

Hochortsaufgelöste optische Spektroskopie an niedrigdimensionalen Halbleiterstrukturen



DISSERTATION

zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

der Naturwissenschaftlichen Fakultät II - Physik
der Universität Regensburg

vorgelegt von
Robert Schuster
aus Regensburg

2005

Promotionsgesuch eingereicht am 18. Mai 2005.

Promotionskolloquium am 14. Juli 2005.

Die Arbeit wurde angeleitet von Prof. Dr. Werner Wegscheider.

Prüfungsausschuss:

Vorsitzender:	Prof. Dr. Tilo Wettig
1. Gutachter:	Prof. Dr. Werner Wegscheider
2. Gutachter:	Prof. Dr. Alfons Penzkofer
weiterer Prüfer:	Prof. Dr. Christian Back

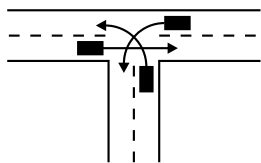
Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Grundlagen	4
2.1	Galliumarsenid-Volumenhalbleiter	4
2.2	Quantenfilme	7
2.3	Quantendrähte	10
2.4	Einschlussenergie	17
2.5	Elastizitätstheorie	19
2.6	Verschiebung und Aufspaltung der Bänder	26
2.7	Piezoelektrische Polarisierung	30
2.8	Zusammenfassung	32
3	Simulationen	33
3.1	Programm nextnano ³	33
3.2	Simulationsparameter	38
3.3	Verspannungsinduzierte Quantendrähte	40
3.4	Verzerrungstensor	42
3.5	Bandstruktur und Wellenfunktionen	49
3.6	Piezoeffekt	52
3.7	Variation der Strukturparameter	54
3.8	Zusammenfassung	58
4	Experimentelle Grundlagen	60
4.1	Überwachsen von Spaltflächen	60
4.2	Optische Eigenschaften	64
4.3	Grenzflächenrauigkeiten	67
4.4	Beschreibung des Mikro-Photolumineszenz-Aufbaus	70
4.5	Räumliche und spektrale Auflösung	75
4.6	Softwareroutinen	79
4.7	Zusammenfassung	81

5	Unverspannte Einfach-Quantendrahtstruktur	82
5.1	Probenaufbau	82
5.2	Identifikation der Photolumineszenz-Signale	84
5.3	Polarisationsabhängige Messungen	88
5.4	Temperaturabhängige Messungen	90
5.5	Leistungsabhängige Messungen	93
5.6	Zusammenfassung	96
6	Struktur mit verspannten T-förmigen Kreuzungen	97
6.1	Probenaufbau	97
6.2	Röntgenbeugung unter streifendem Einfall	98
6.3	Nachweis der Verspannungsmodulationen	103
6.4	Identifikation der Photolumineszenz-Signale	112
6.5	Polarisationsabhängige Messungen	115
6.6	Temperaturabhängige Messungen	117
6.7	Zusammenfassung	119
7	Verspannungsinduzierte Einfach-Quantendrähte	120
7.1	Probenaufbau	120
7.2	Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen	122
7.3	Identifikation der Photolumineszenz-Signale	125
7.4	Polarisationsabhängige Messungen	136
7.5	Temperaturabhängige Messungen	138
7.6	Leistungsabhängige Messungen	141
7.7	Zusammenfassung	147
8	Laufende Arbeiten	149
8.1	Glättung der Quantenfilmgrenzfläche	149
8.2	Simulation alternativer Strukturen	160
8.3	Zusammenfassung	164
9	Zusammenfassung	166

Liste der verwendeten Abkürzungen	170
Abbildungs- und Tabellenverzeichnis	171
Literatur	174

1 Einleitung



An Kreuzungen und Einmündungen hat die Vorfahrt, wer von rechts kommt (§ 8 Abs. 1 Satz 1, StVO).

Wer abbiegen will, muss entgegenkommende Fahrzeuge durchfahren lassen, ... (§ 9 Abs. 3 Satz 1, StVO).

Schon an makroskopischen Kreuzungen können verwinkelte Situationen entstehen. Noch viel interessanter gestalten sich die Verhältnisse an T-förmigen Kreuzungen, deren Ausmaße um neun Größenordnungen kleiner sind. Mit derartigen, aus verschiedenen Halbleitermaterialien bestehenden Systemen, die einen räumlichen Einschluss der Ladungsträger erlauben, befasst sich die vorliegende Arbeit.

Schichtdicken im Nanometerbereich zeugen von der fortschreitenden Miniaturisierung, die noch immer die Richtung für die Halbleiterentwicklung in Forschung und Industrie vorgibt. Mit der Verlagerung zu kleineren Längenskalen stößt man in ein Gebiet vor, in dem Quanteneffekte in den Vordergrund rücken. Deshalb nimmt die Physik niedrigdimensionaler Halbleitersysteme immer mehr eine Schlüsselposition ein. Ausgangspunkt der Entwicklung war am Ende der 1960er Jahre die Idee für eine Übergitterstruktur [Esa69]. Inzwischen hat die Halbleiterforschung eine Vielzahl von Anwendungen hervorgebracht, die in den Alltag Einzug hielten. So decken heute beispielsweise Leuchtdioden den gesamten sichtbaren Spektralbereich ab und Halbleiterlaser sind in jedem CD- und DVD-Abspielgerät zu finden. Diese Laser werden auch in Glasfaserübertragungssystemen eingesetzt, deren Verbreitung in globalen Kommunikationsnetzwerken mit Elan vorangetrieben wird.

Aus dem weiten Spektrum der Forschungsaktivität in der Halbleiterphysik gehen fortlaufend neue Konzepte hervor, die die Basis für zukünftige Anwendungen schaffen. So werden niedrigdimensionale Halbleiternanostrukturen auf internationalen Konferenzen auch im Hinblick auf die Realisierung eines festkörperbasierten Quantencomputers diskutiert [Los98]. Neue Hybridstrukturen wie der lichtemittierende Transistor wurden vorgestellt [Fen04] und es ist inzwischen möglich, einzelne Wellenfunktionen mit nano-optischen Methoden abzubilden [Mat03].

Die skizzierte rasche Entwicklung basiert auf technologischen Fortschritten in den epitaktischen Herstellungsmethoden, welche die strukturelle Qualität niedrigdimensionaler Systeme enorm verbesserten. Vor allem mit dem Verfahren der Molekularstrahlepitaxie kann das Kristallwachstum atomlagengenau kontrolliert werden. Da neben der Dicke der Schichten deren Materialzusammensetzung die elektronischen und optischen Eigen-

schaften festlegt, werden nicht nur binäre Verbindungshalbleiter sondern auch ternäre und quaternäre Mischkristalle bei der Bauelemententwicklung gezielt zur Frequenzabstimmung eingesetzt. In optoelektronischen Anwendungen, die aufgrund des Wechselspiels zwischen Licht und Materie funktionieren, kommt Halbleitern mit direkter Bandlücke eine tragende Rolle zu.

Derartige Materialsysteme sind auch für die vorliegende Arbeit von Bedeutung, welche die Grundlage für eine mögliche Realisierung einer eindimensionalen Halbleiterlaserstruktur bildet. Motiviert werden die Untersuchungen durch die prinzipiellen Vorteile niedrigdimensionaler Systeme. So sinkt zum Beispiel mit abnehmender Dimension der Schwellstrom bei gleichzeitig reduzierter Temperaturabhängigkeit [Ara82]. Im Rahmen dieser Arbeit werden eindimensionale Quantendrähte durch Überwachsen von Spaltflächen realisiert. Mit dieser speziellen Methode der Molekularstrahlepitaxie kann man durch Wachstum entlang zweier zueinander senkrechter Richtungen T-förmige Strukturen herstellen, die eine Lokalisierung der Ladungsträger ermöglichen.

Um aus solchen Systemen attraktive Raumtemperatur-Anwendungen entwickeln zu können, ist es entscheidend, dass die Zustände im eindimensionalen Quantendraht energetisch stark gegenüber denen in den konstituierenden Quantenfilmen abgesenkt sind. Bislang beschränkte sich die Optimierung des Ladungsträgereinschlusses auf die Variation von Strukturparametern. Elastische Verspannungen, die aus den unterschiedlichen Gitterkonstanten der verwendeten Materialien resultieren, wurden dabei nur unterstützend genutzt.

In der vorliegenden Arbeit steht jedoch die gezielte Verwendung dieses zusätzlichen Systemparameters zur Herstellung rein verspannungsinduzierter Einfach-Quantendrähte im Mittelpunkt. Numerische Simulationen verdeutlichen das neue Einschlusskonzept und quantifizieren den Ladungsträgereinschluss in derartigen Halbleiterheterostrukturen. Nach Voruntersuchungen mit Röntgenbeugung unter streifendem Einfall und mit Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen erfolgt die experimentelle Charakterisierung durch Mikro-Photolumineszenz-Messungen, deren Resultate unter Berücksichtigung der Berechnungen dargestellt und interpretiert werden.

Zunächst gibt Kapitel 2 einen Überblick über wichtige Eigenschaften niedrigdimensionaler Halbleiterstrukturen und stellt das Konzept herkömmlicher T-förmiger Quantendrähte vor. Mit den diskutierten Aspekten der Elastizitätstheorie lässt sich die neuartige, verspannte Probenstruktur verstehen, die in Kapitel 3 eingeführt wird. Dieser Abschnitt präsentiert die Ergebnisse der Simulationen für einen rein verspannungsinduzierten Quantendraht, ehe sich Kapitel 4 mit den experimentellen Grundlagen befasst.

Neben der Beschreibung des Versuchsaufbaus geht es hier um die Methode des Überwachens von Spaltflächen und um Grenzflächenrauigkeiten.

In den folgenden Abschnitten sind die experimentellen Resultate zusammengestellt. Kapitel 5 behandelt Mikro-Photolumineszenz-Untersuchungen an einer unverspannten Quantendrahtstruktur, die als Referenz für die weiteren Messungen dienen. Der erste Teil von Kapitel 6 hat Röntgenbeugungsexperimente unter streifendem Einfall zum Thema, die an verspannten Proben durchgeführt wurden. Anschließend werden die Ergebnisse der optischen Untersuchungen dieser Strukturen vorgestellt. Das zentrale Kapitel 7 berichtet über die erste Realisierung rein verspannungsinduzierter Einfach-Quantendrähte. Deren Eigenschaften kann man mit polarisations-, temperatur- und leistungsabhängigen Photolumineszenz-Messungen bestimmen und verstehen.

Kapitel 8 widmet sich zuerst einem neuen Verfahren zur Verringerung von Rauigkeiten an Heterogrenzflächen. Neben dieser technologischen Verbesserung werden auf der Basis von numerischen Simulationen auch viel versprechende Ansätze für innovative Materialkombinationen in verspannten Strukturen diskutiert. Abschließend wiederholt die Zusammenfassung die wichtigsten Resultate aller Kapitel.

2 Theoretische Grundlagen

Das folgende Kapitel behandelt die Eigenschaften niedrigdimensionaler Halbleiterstrukturen und führt Größen ein, die für die weitere Arbeit von Bedeutung sind. Ausgehend vom Volumenmaterial werden die grundlegenden Merkmale von zwei- und eindimensionalen Systemen vorgestellt sowie Elektron- und Lochwellenfunktionen anhand einer konkreten Strukturgeometrie präsentiert. Wichtige Konzepte der Elastizitätstheorie und die Diskussion der Auswirkungen von Verzerrungen auf die Bandstruktur runden diesen Abschnitt ab.

2.1 Galliumarsenid-Volumenhalbleiter

Alle in dieser Arbeit untersuchten Halbleiter kristallisieren unter den gewählten Wachstumsbedingungen in der Zinkblendestruktur. Diese wird aus einem kubisch flächenzentrierten Raumgitter mit einer zweiatomigen Basis gebildet. Für Galliumarsenid (GaAs) ist in Abbildung 1 exemplarisch die Elementarzelle dargestellt. Die Basisatome Gallium und Arsen besitzen die Koordinaten $(0; 0; 0)$ und $(\frac{a}{4}; \frac{a}{4}; \frac{a}{4})$. Mit a ist die Gitterkonstante von GaAs bezeichnet, deren Wert rund 0,56 nm beträgt. Die Bindung zwischen den Atomen erfolgt über sp^3 -Hybridorbitale. Aufgrund der unterschiedlichen Elektronegativitäten hat die Bindung auch einen ionischen Charakter. Jedes Arsen-Anion befindet sich im Zentrum eines regulären Tetraeders aus Gallium-Kationen und umgekehrt.

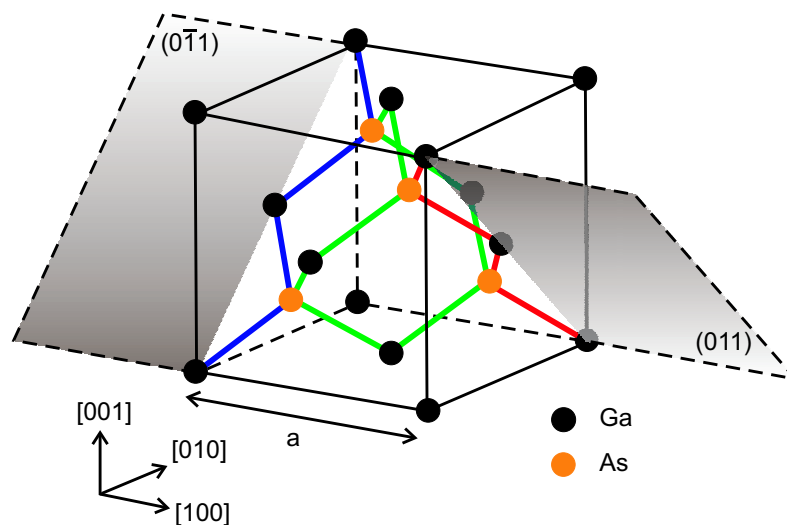


Abbildung 1: Kristallstruktur von GaAs mit den bevorzugten Spaltebenen. Auf die blau und rot markierten Bindungsketten wird in Kapitel 8.1 Bezug genommen.

Zusätzlich sind in Abbildung 1 auch die (011)- und (0 $\bar{1}$ 1)-Ebenen angedeutet, die für Zinkblendestrukturen bevorzugte Spaltflächen darstellen (siehe Kapitel 4.1). Die blau und rot markierten Bindungsketten sind erst bei der Diskussion der Grenzflächen-glättung in Abschnitt 8.1 von Bedeutung.

Wird der Anteil x der Plätze der Gallium-Atome statistisch durch Aluminium-Atome ersetzt, erhält man den Mischkristall Aluminiumgalliumarsenid ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$). Dies gilt in analoger Weise für Indiumgalliumarsenid ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) und Indiumaluminium-arsenid ($\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$), welche für die vorliegende Arbeit relevant sind.

Die räumliche Struktur des Halbleiters bildet die Grundlage für die Bandstrukturbestimmung. Aus dem Verlauf der Energiebänder und dem Grad ihrer Besetzung lassen sich wichtige Informationen über die elektrischen und optischen Eigenschaften eines Festkörpers gewinnen. Abbildung 2(a) zeigt die berechnete Bandstruktur von GaAs, die unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung gewonnen wurde. Dabei bezeichnen Γ , X, L und K Punkte hoher Symmetrie in der Brillouinzone. Dem Graphen kann entnommen werden, dass GaAs eine direkte Bandlücke am Γ -Punkt, dem Zentrum der Brillouinzone, besitzt. Dies gilt auch für Indiumarsenid (InAs), während Aluminiumarsenid (AlAs) eine indirekte Bandlücke aufweist.

Für GaAs gibt Abbildung 2(b) schematisch die Bandverläufe nahe der direkten Bandlücke wieder, wobei hier auch das abgespaltene Lochband eingezeichnet ist. Die zunächst sechsfache Entartung des p-artigen Valenzbands (engl.: valence band) wird durch die Spin-Bahn-Kopplung teilweise aufgehoben. So ist das zweifach entartete abgespal-

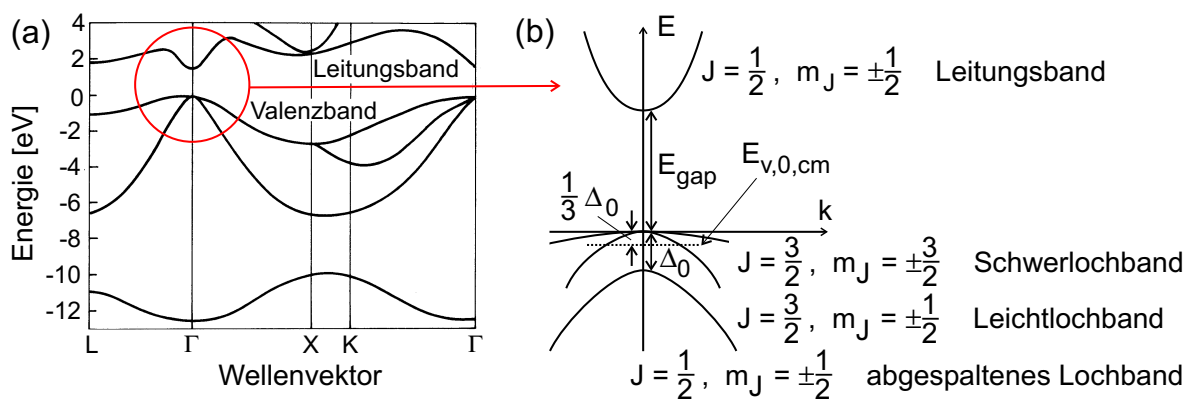


Abbildung 2: (a) Unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Wechselwirkung berechnete Bandstruktur von GaAs (aus [Kel95]). (b) Schematische Darstellung der Bandverläufe am Γ -Punkt.

tene Lochband mit Drehimpuls $J = \frac{1}{2}$ energetisch um den Betrag Δ_0 gegenüber den ($J = \frac{3}{2}$)-Bändern abgesenkt. Das Schwerlochband mit Quantenzahl $m_J = \pm \frac{3}{2}$ und das Leichtlochband mit Quantenzahl $m_J = \pm \frac{1}{2}$ sind am Γ -Punkt entartet. Entsprechend den englischen Übersetzungen „heavy hole“ und „light hole“ für Schwerloch und Leichtloch bzw. „split-off band“ für das abgespaltene Lochband werden die Bandkanten der Valenzbänder mit $E_{v,0,hh}$, $E_{v,0,lh}$ und $E_{v,0,so}$ bezeichnet. Der Index 0 deutet an, dass der Kristall keinen weiteren Einflüssen unterworfen ist. Generell wird in der vorliegenden Arbeit für Abkürzungen und Indizes die gebräuchliche englische Notation verwendet. Für das Valenzband ergeben sich folgende Beziehungen für die Lage der Bandkanten $E_{v,0,hh}$, $E_{v,0,lh}$ und $E_{v,0,so}$ bezüglich des Schwerpunkts (engl.: center of mass) $E_{v,0,cm}$:

$$\begin{aligned} E_{v,0,hh} = E_{v,0,lh} &= E_{v,0,cm} + \frac{1}{3}\Delta_0, \\ E_{v,0,so} &= E_{v,0,cm} - \frac{2}{3}\Delta_0. \end{aligned}$$

Das s-artige Leitungsband (engl: conduction band) ist zweifach spinentartet. Bezeichnet $E_{c,0}^\Gamma$ das Minimum des Leitungsbands am Γ -Punkt, gilt für die Bandlücke (engl.: band gap) E_{gap} folgende Beziehung:

$$E_{\text{gap}} = E_{c,0}^\Gamma - \left(E_{v,0,cm} + \frac{1}{3}\Delta_0 \right). \quad (1)$$

Das Schwerlochband besitzt eine geringere Krümmung – und damit einhergehend eine größere effektive Masse – als das Leichtlochband. Die Entartung dieser beiden Bänder am Γ -Punkt kann durch im Kristall eingebaute Verspannungen oder durch einen Bruch der Translationssymmetrie aufgehoben werden. Beide Effekte treten auch bei den in der vorliegenden Arbeit untersuchten Strukturen auf.

Am absoluten Temperaturnullpunkt sind in reinen Halbleitern die Leitungsbänder leer, die Valenzbänder jedoch vollständig besetzt. Wechselwirkt nun ein Photon, dessen Energie größer als E_{gap} ist, mit dem Halbleiter, dann kann es absorbiert werden. Dabei wird ein Elektron vom Valenz- ins Leitungsband gehoben (siehe auch Kapitel 4.2). Elektron und zurückbleibendes Loch bewegen sich aber nicht unabhängig voneinander, sondern unterliegen der Coulombanziehung. So kann es zur Ausbildung gebundener Elektron-Loch-Paare kommen. Derartige Quasiteilchen werden Exzitonen genannt und mit dem Symbol X gekennzeichnet.

Sind, wie im Fall von Molekül- und Ionenkristallen, Elektron und Loch am gleichen Gitteratom lokalisiert, wird von Frenkel-Exzitonen gesprochen. In Halbleitern, bei denen eine relativ schwache Bindung der Elektronen an die Gitteratome vorliegt, ist der Elektron-Loch-Abstand relativ groß im Vergleich zur Distanz der Gitteratome. Diese Quasiteilchen, die im vorliegenden Materialsystem von Bedeutung sind, werden als

(Mott-)Wannier-Exzitonen bezeichnet. Da sie einem dem Wasserstoff-Atom ähnlichen System entsprechen, kann ihre (Grundzustands-)Bindungsenergie

$$E_{B,X}^{3d} = 13,6 \text{ eV} \cdot \frac{\mu}{m_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_r} \right)^2 \quad (2)$$

und ihr Bohrradius

$$a_{B,X}^{3d} = 5,29 \cdot 10^{-11} \text{ m} \cdot \frac{m_0}{\mu} \varepsilon_r$$

im dreidimensionalen Volumenmaterial (3d) ermittelt werden. In obigen Gleichungen bezeichnet $\mu = \frac{m_e m_{hh,av}}{m_e + m_{hh,av}}$ die reduzierte Masse des Schwerloch-Exzitons und m_0 die Ruhemasse des Elektrons. Mit den in Tabelle 1 auf Seite 38 aufgelisteten Werten für die Elektronmasse m_e , die mittlere (engl.: average) Schwerlochmasse $m_{hh,av}$ und die relative Dielektrizitätskonstante ε_r folgt für GaAs ein Bohrradius von 11,5 nm. Die Exziton-Bindungsenergie, für die sich ein Wert von 4,86 meV errechnet, bewirkt, dass der Exziton-Grundzustand innerhalb der Bandlücke liegt.

2.2 Quantenfilme

Der folgende Abschnitt stellt die grundlegenden Merkmale von Quantenfilmstrukturen vor und diskutiert die Wirkung der reduzierten Dimensionalität auf die Eigenschaften von Exzitonen. Im Gegensatz zum Volumenhalbleiter setzt sich ein Quantenfilm (QW, engl.: quantum well) aus mehreren parallelen Schichten zusammen, wie in Abbildung 3(a) dargestellt ist. Derartige Strukturen können mit dem Verfahren der Molekularstrahlepitaxie (siehe auch Kapitel 4.1) hergestellt werden. Ein als Trog oder Film bezeichnetes Material ist in einem anderen, das eine größere Bandlücke besitzt und Barriere genannt wird, eingebettet.

Aus der (in x -Richtung) gewachsenen Schichtsequenz lassen sich die Bandkantenprofile ermitteln. Aufgrund der fast identischen Gitterkonstanten von GaAs und $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ müssen dabei keine Verspannungseffekte berücksichtigt werden. Wie man in Abbildung 3(b) sehen kann, zeigt die unverspannte Leitungsbandkante $E_{c,0}$ einen topfartigen Verlauf im Bereich des Quantenfilms. Ist dessen Breite d kleiner oder von ähnlicher Größe wie der Bohrradius der in der Topfstruktur befindlichen Teilchen, so sind diese nur noch in der Filmebene frei beweglich. Damit stellt ein Quantenfilm eine zweidimensionale Struktur dar.

In vorliegenden Fall stellt sich auch im Valenzband ein topfartiger Verlauf der Bandkanten ein, wobei hier die energetisch höchste Position im Bereich des Quantenfilms

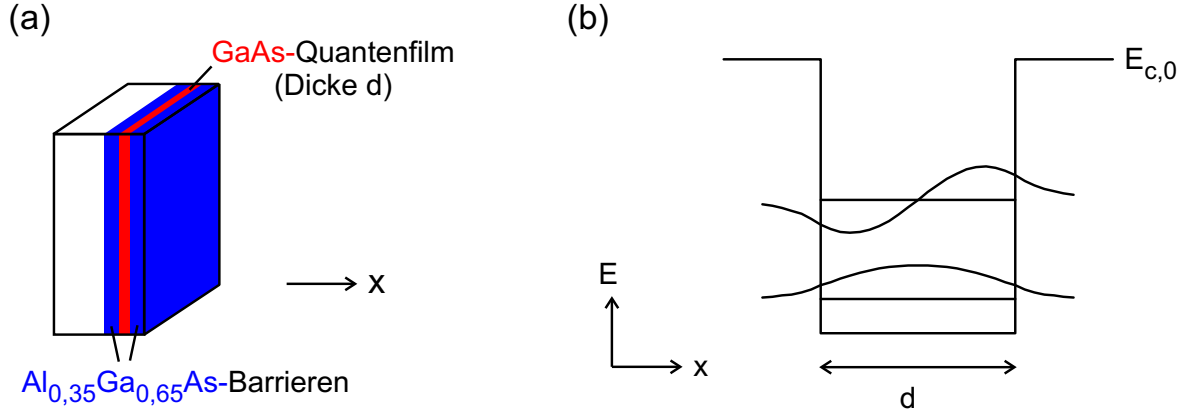


Abbildung 3: (a) Skizze einer $\text{GaAs}/\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Quantenfilmstruktur. (b) Leitungsbandkante und Wellenfunktionen in einem Quantenfilm mit endlich hohen Barrieren.

liegt. Diese Konfiguration, in der sowohl Elektronen als auch Löcher am selben Ort räumlich eingeschränkt sind, wird als Typ-I-Quantenfilm bezeichnet.

Ausgangspunkt für die Berechnung der quantisierten Zustände im Leitungs- und Valenzband ist die zeitunabhängige Schrödingergleichung:

$$H\Psi = E\Psi.$$

Bei gegebenem Hamiltonoperator H des Systems sind die Eigenfunktionen Ψ und die Eigenenergien E gesucht. Innerhalb der Effektive-Masse-Theorie lässt sich obige Gleichung wie folgt umschreiben [Hac02]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \left[M^{-1}(\vec{x}) \vec{\nabla} \right] + E_{c,0}(\vec{x}) \right] \varphi(\vec{x}) = E_e \varphi(\vec{x}), \quad (3)$$

$$\left[+\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \left[M^{-1}(\vec{x}) \vec{\nabla} \right] + E_{v,0,hh/lh}(\vec{x}) \right] \varphi(\vec{x}) = E_{hh/lh} \varphi(\vec{x}). \quad (4)$$

Wie üblich stehen \hbar und $\vec{\nabla}$ für den durch 2π geteilten Wert der Planck'schen Konstante und für den Nablaoperator. Wichtig ist, dass in den Tensor M^{-1} die effektiven Massen eingehen, die sich aus den Kristalleigenschaften ergeben. Wie zuvor bezeichnet $E_{c,0}$ das Leitungsbandminimum und $E_{v,0,hh/lh}$ das Maximum des Schwerloch- bzw. des Leichtlochbands. Gesucht sind nun die einhüllenden Wellenfunktionen $\varphi(\vec{x})$, die innerhalb der Effektive-Masse-Theorie über den gitterperiodischen Anteil $u(\vec{x})$ der Blochfunktion am Brillouinzone nmittelpunkt mit der Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$ zusammenhängen [Dav98]:

$$\Psi(\vec{x}) = \varphi(\vec{x}) u(\vec{x}). \quad (5)$$

Im konkreten Fall eines zweidimensionalen Quantenfilms, der durch ein eindimensionales Einschlusspotential in x -Richtung gebildet wird, reduzieren sich die Gleichungen (3) und (4) im Hauptachsensystem zu [Dav98]:

$$\left[-\frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar^2}{2m_e(x)} \frac{\partial}{\partial x} + E_{c,0}(x) \right] \varphi_e(x) = E_e \varphi_e(x), \quad (6)$$

$$\left[+\frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar^2}{2m_{hh/lh}(x)} \frac{\partial}{\partial x} + E_{v,0,hh/lh}(x) \right] \varphi_{hh/lh}(x) = E_{hh/lh} \varphi_{hh/lh}(x). \quad (7)$$

Für die betrachtete x -Richtung sind Elektron- und Lochmassen abschnittsweise konstant. Ebenso ändert sich der örtliche Verlauf der Bandkanten nur an den Heterogrenzflächen, wie man in Abbildung 3(b) für das Leitungsband sehen kann. Hier sind auch die einhüllenden Wellenfunktionen zu den zwei niederenergetischsten Eigenwerten eingezeichnet, welche sich aus Gleichung (6) ergeben. Eine Analyse der Lösung zeigt, dass es bei einer Vergrößerung der Breite d des Quantenfilms zu einer Absenkung dieser Energieniveaus im Leitungsband kommt.

Die in obigen Gleichungen gewählte Konvention definiert Elektron- und Lochenergien auf einer gemeinsamen Skala. Damit befinden sich in dieser Arbeit die quantisierten Zustände oberhalb der Leitungs- und unterhalb der Valenzbandkante. Aufgrund der unterschiedlichen effektiven Massen liegt im zweidimensionalen Quantenfilm das Schwerlochband energetisch höher als das Leichtlochband. Da Elektronen und Löcher in x -Richtung quantisiert sind, sich aber in der Quantenfilmebene frei bewegen können, gehört zu jedem Eigenwert ein Subband. Die daraus resultierende reduzierte Zustandsdichte wird auf Seite 16 dem drei- und eindimensionalen Fall gegenübergestellt.

Der Übergang vom Volumenhalbleiter zum zweidimensionalen Quantenfilm verkompliziert außerdem die Valenzbandstruktur durch Mischen der Bänder [Yup96]. Aus diesem Grund verlieren die Bezeichnungen „Schwerloch“ und „Leichtloch“ eigentlich ihre Bedeutung. Das gilt umso mehr, als in der Quantenfilmebene das Schwerlochband die kleinere effektive Masse besitzt. Dieser Effekt wird Massenumkehr genannt. Trotzdem haben sich in der Literatur für die Zustände $m_J = \frac{3}{2}$ und $m_J = \frac{1}{2}$ die Bezeichnungen „Schwerloch“ und „Leichtloch“ durchgesetzt und werden auch in dieser Arbeit verwendet.

Die Einschränkung in einer Dimension hat eine verstärkte Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Loch zur Folge. Aus diesem Grund ist die Exziton-Bindungsenergie im Vergleich zum dreidimensionalen Fall erhöht. Ein erstes Modell geht von

einem unendlich hohen Kastenpotential und ideal zweidimensionalen Exzitonen (2d) aus und liefert [Kli97]:

$$E_{B,X}^{2d} = E_{B,X}^{3d} \left(n_B - \frac{1}{2} \right)^{-2}. \quad (8)$$

Setzt man für den Grundzustand die Hauptquantenzahl $n_B = 1$, ergibt sich der vierfache Wert von $E_{B,X}^{3d}$ aus Gleichung (2). Dieses Modell muss noch verbessert werden, da sich das System für breiter werdende Quantenfilme dem dreidimensionalen Fall nähert. Außerdem dringen mit abnehmender Quantenfilmdicke die einhüllenden Wellenfunktionen immer mehr in die Barriere ein, da reale Strukturen nur endliche Bandsprünge aufweisen.

Den Abweichungen von einem exakt zweidimensionalen System wird durch die Einführung eines gebrochendimensionalen Raums Rechnung getragen. Aus der effektiven Filmbreite \tilde{d} und dem mittleren Exziton-Bohrradius $\tilde{a}_{B,X}$ ergibt sich der Dimensionsparameter δ zu [Mat92]:

$$\delta = 3 - \exp \left[-\frac{\tilde{d}}{2\tilde{a}_{B,X}} \right].$$

Für einen 7 nm breiten GaAs-Quantenfilm, der zwischen Barrieren aus $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ eingebettet ist, hat δ zum Beispiel einen Wert von rund 2,4. Mit dem Dimensionsparameter kann für das Exziton eine Bindungsenergie von

$$E_{B,X}^{\delta d} = E_{B,X}^{3d} \left(n_B + \frac{\delta - 3}{2} \right)^{-2} \quad (9)$$

angegeben werden [Hex91], die im ideal zweidimensionalen Fall ($\delta=2$) mit Gleichung (8) übereinstimmt.

2.3 Quantendrähte

Die Einschränkung der Bewegungsfreiheit der Ladungsträger auf eine Dimension setzt Einschlusspotentiale in den zwei anderen Richtungen voraus. Ein derartiges System bezeichnet man als Quantendraht (QWR, engl.: quantum wire). Es kann beispielsweise durch Heteroschichtwachstum entlang zweier zueinander senkrechter Richtungen hergestellt werden. Vorteile und Details dieses als „Überwachsen von Spaltflächen“ bekannten Verfahrens sind in Kapitel 4.1 aufgeführt. Im Folgenden wird die Geometrie der unverspannten $\text{GaAs}/\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Quantendrahtsysteme vorgestellt. Daran schließt sich die Diskussion der zugehörigen Wellenfunktionen an. Am Ende des Abschnitts wird auf die Vorteile eindimensionaler Strukturen eingegangen.

Strukturgeometrie

Abbildung 4(a) skizziert den Verlauf der Leitungsbandkante $E_{c,0}$. Zeigt die Energieachse nach unten, ist das Schema auch für die Valenzbandkante $E_{v,0}$ gültig. In zwei aufeinander folgenden Schritten wurden in $[100]$ - und anschließend in $[011]$ -Richtung Typ-I-Quantenfilme gewachsen, an deren Schnittpunkt sich eine T-förmige Kreuzung bildet. An dieser Stelle steht der Wellenfunktion ein größeres Volumen zur Verfügung. Wie beim Verbreitern der Quantenfilmdicke d kommt es deshalb im Kreuzungsbereich zu einer Absenkung der Grundzustandsenergie. Dieser rein quantenmechanische Effekt sorgt dafür, dass die dort befindlichen Ladungsträger nur noch eine Bewegungsfreiheit entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung besitzen.

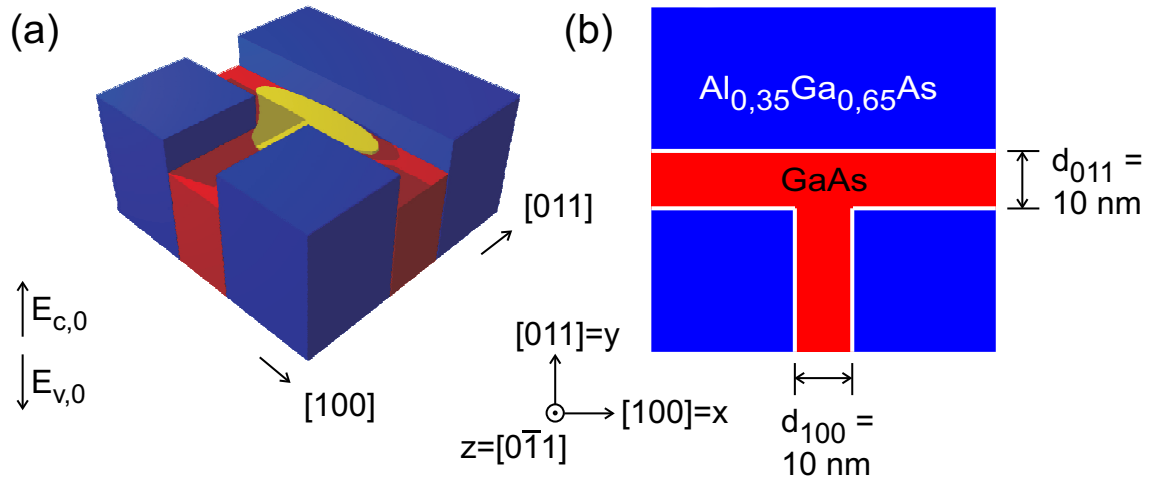


Abbildung 4: (a) Schematischer Bandkantenverlauf an einer T-förmigen Kreuzung, wobei für das Valenzband die Energieachse nach unten zeigt. Die Wellenfunktion der Elektronen bzw. der Löcher ist gelb angedeutet. (b) Quantendrahtstruktur mit zwei 10 nm breiten GaAs-Quantenfilmen.

Ein Schema einer derartigen Quantendrahtstruktur ist in Abbildung 4(b) zu sehen. Der eindimensionale Ladungsträgereinschluss erfolgt an der T-förmigen Kreuzung zweier je 10 nm breiter GaAs-Quantenfilme, die in einer Al_{0,35}Ga_{0,65}As-Barriere eingebettet sind. Die Skizze zeigt außerdem die im Folgenden verwendete Konvention, in der die x -, y - und z -Achsen entlang der $[100]$ -, $[011]$ - und $[0\bar{1}1]$ -Richtungen verlaufen.

Anisotropie der Lochmassen

Die in Abbildung 4(a) schematisch dargestellte Wellenfunktion kann innerhalb der Effektive-Masse-Theorie berechnet werden. Da die Unterschiede in den Gitterkonstan-

ten von GaAs und $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ sehr klein sind, geht man dabei wie im unverspannten, eindimensionalen Fall von den Gleichungen (3) und (4) aus und vernachlässigt zudem wieder die exzitonischen Effekte. Im Rahmen dieser Näherungen gelten dann folgende Gleichungen für Elektronen und Löcher:

$$\left[-\frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar^2}{2m_e(x,y)} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y} \frac{\hbar^2}{2m_e(x,y)} \frac{\partial}{\partial y} + E_{c,0}(x,y) \right] \varphi_e^{\text{QWR}}(x,y) = E_e^{\text{QWR}} \varphi_e^{\text{QWR}}(x,y), \quad (10)$$

$$\left[+\frac{\partial}{\partial x} \frac{\hbar^2}{2m_{hh/lh}^{[100]}(x,y)} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\hbar^2}{2m_{hh/lh}^{[011]}(x,y)} \frac{\partial}{\partial y} + E_{v,0,hh/lh}(x,y) \right] \varphi_{hh/lh}^{\text{QWR}}(x,y) = E_{hh/lh}^{\text{QWR}} \varphi_{hh/lh}^{\text{QWR}}(x,y). \quad (11)$$

Erneut sind die effektiven Massen abschnittsweise konstant, wobei der Wert an der Position (x,y) durch das dort befindliche Material bestimmt wird. Während für die Elektronen eine isotrope Masse m_e verwendet werden kann, ist die Lochmasse richtungsabhängig. Wieder entsprechen die x - und y -Achsen den $[100]$ - und $[011]$ -Richtungen.

Die Anisotropie der Lochmassen ergibt sich aus der $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Methode, die ein im Vergleich zur Effektive-Masse-Näherung komplexeres Verfahren zur Bandstrukturberechnung darstellt. Im Rahmen dieser Theorie wurde von Luttinger durch die Ausnutzung der Kristallsymmetrien folgender Hamiltonoperator für das Valenzband hergeleitet [Lut56]:

$$H^v = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) k^2 - 2\gamma_2 \left(k_{\tilde{x}}^2 J_{\tilde{x}}^2 + k_{\tilde{y}}^2 J_{\tilde{y}}^2 + k_{\tilde{z}}^2 J_{\tilde{z}}^2 \right) - 2\gamma_3 \left(k_{\tilde{x}} k_{\tilde{y}} (J_{\tilde{x}} J_{\tilde{y}} + J_{\tilde{y}} J_{\tilde{x}}) + k_{\tilde{y}} k_{\tilde{z}} (J_{\tilde{y}} J_{\tilde{z}} + J_{\tilde{z}} J_{\tilde{y}}) + k_{\tilde{z}} k_{\tilde{x}} (J_{\tilde{z}} J_{\tilde{x}} + J_{\tilde{x}} J_{\tilde{z}}) \right) \right]. \quad (12)$$

In der Formel ist m_0 die Ruhemasse des Elektrons. Mit \tilde{x} , \tilde{y} und \tilde{z} werden die Achsen der Elementarzelle, also die $[100]$ -, $[010]$ - und $[001]$ -Kristallrichtungen, und mit $J_{\tilde{x}}$, $J_{\tilde{y}}$ und $J_{\tilde{z}}$ die Komponenten des Drehimpulsoperators bezeichnet. Die dimensionslosen (Kohn-)Luttingerparameter γ_1 , γ_2 und γ_3 sind materialspezifisch.

Weiterhin lässt sich zeigen, dass aufgrund der Symmetrie der Zinkblendestruktur folgende Näherungen für die Dispersionen von Schwerloch und Leichtloch in der Nähe des Γ -Punkts gültig sind [Lim94]:

$$E_{v,hh} = E_{v,0,hh} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 - \sqrt{B^2 k^4 + C^2 \left(k_{\tilde{x}}^2 k_{\tilde{y}}^2 + k_{\tilde{y}}^2 k_{\tilde{z}}^2 + k_{\tilde{z}}^2 k_{\tilde{x}}^2 \right)} \right], \quad (13)$$

$$E_{v,lh} = E_{v,0,lh} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 + \sqrt{B^2 k^4 + C^2 \left(k_{\tilde{x}}^2 k_{\tilde{y}}^2 + k_{\tilde{y}}^2 k_{\tilde{z}}^2 + k_{\tilde{z}}^2 k_{\tilde{x}}^2 \right)} \right]. \quad (14)$$

Wie in Gleichung (12) sorgt das erste Minuszeichen für ein Maximum im Valenzband. Die dimensionslosen Konstanten A , B und C stehen dabei in folgender Weise mit den Luttingerparametern im Zusammenhang [Lim94]:

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= A, \\ \gamma_2 &= \frac{B}{2}, \\ \gamma_3 &= \sqrt{\frac{B^2}{4} + \frac{C^2}{12}}.\end{aligned}$$

Durch Auflösen nach A , B und C und Einsetzen in (13) und (14) ergibt sich nun:

$$\begin{aligned}E_{v,hh} &= E_{v,0,hh} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\gamma_1 k^2 - 2\sqrt{\gamma_2^2 k^4 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)} \right], \\ E_{v,lh} &= E_{v,0,lh} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\gamma_1 k^2 + 2\sqrt{\gamma_2^2 k^4 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)} \right].\end{aligned}$$

Da im Allgemeinen $\gamma_2 \neq \gamma_3$ gilt, befinden sich die Punkte konstanter Energie im reziproken Raum auf „verformten Kugeln“ (engl.: „warped spheres“). Dies ist eine unmittelbare Konsequenz des kubischen Kristallsystems.

Diese Abweichung von der sphärischen Symmetrie wirkt sich direkt auf die effektiven Massen aus. Die Werte für eine bestimmte Richtung folgen aus der Projektion der Drehimpulsoperatoren in Gleichung (12) auf ein Koordinatensystem, das diese Richtung enthält [Hen74]. Im Einzelnen kann man folgende Zusammenhänge für die effektiven Massen von Schwer- und Leichtloch in [100]- und [011]-Richtung angeben [Ada94]:

$$\frac{m_0}{m_{hh}^{[100]}} = \gamma_1 - 2\gamma_2, \quad (15)$$

$$\frac{m_0}{m_{lh}^{[100]}} = \gamma_1 + 2\gamma_2, \quad (16)$$

$$\frac{m_0}{m_{hh}^{[011]}} = \gamma_1 - \frac{1}{2}(\gamma_2 + 3\gamma_3), \quad (17)$$

$$\frac{m_0}{m_{lh}^{[011]}} = \gamma_1 + \frac{1}{2}(\gamma_2 + 3\gamma_3). \quad (18)$$

Als wichtiges Resultat ergibt sich, dass die Lochmasse (für $\gamma_2 \neq \gamma_3$) entsprechend den Gleichungen (15) bis (18) anisotrop ist. Diese Tatsache wird bei den im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen berücksichtigt. Das bedeutet, dass in den relevanten Probenbereichen obige Formeln für die Lochmassen in die Rechnungen eingehen. Eine derartige Vorgehensweise ist auch in den Referenzen [Glu97] und [Wal97] zu finden. Beispielrechnungen zeigen, dass es innerhalb der Barrieren jedoch genügt,

mit isotropen, durchschnittlichen Massen $m_{hh,av}$ und $m_{lh,av}$ zu arbeiten. Deren Werte ergeben sich durch sphärische Mittelung über alle Richtungen [Bal73]:

$$\frac{m_0}{m_{hh,av}} = \gamma_1 - 0,8\gamma_2 - 1,2\gamma_3, \quad (19)$$

$$\frac{m_0}{m_{lh,av}} = \gamma_1 + 0,8\gamma_2 + 1,2\gamma_3. \quad (20)$$

Aufenthaltswahrscheinlichkeiten

Für die in Abbildung 4(b) gezeigte Quantendrahtstruktur wurden die Gleichungen (10) und (11) mit dem Programm **nextnano**³, das in Kapitel 3.1 vorgestellt wird, numerisch gelöst. Dabei gingen die in Tabelle 1 auf Seite 38 aufgelisteten Parameter in die Rechnungen ein. Die so gewonnene Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Betragsquadrat der einhüllenden Wellenfunktion) ist in Abbildung 5 für Elektron, Schwer- und Leichtloch dargestellt, wobei das Maximum jeweils auf den Wert eins normiert wurde. Man kann klar erkennen, dass die Elektronwellenfunktion an der Kreuzung lokalisiert ist und auch deren Symmetrie aufweist. Auch die Konturlinien der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Löcher geben die T-Form wieder.

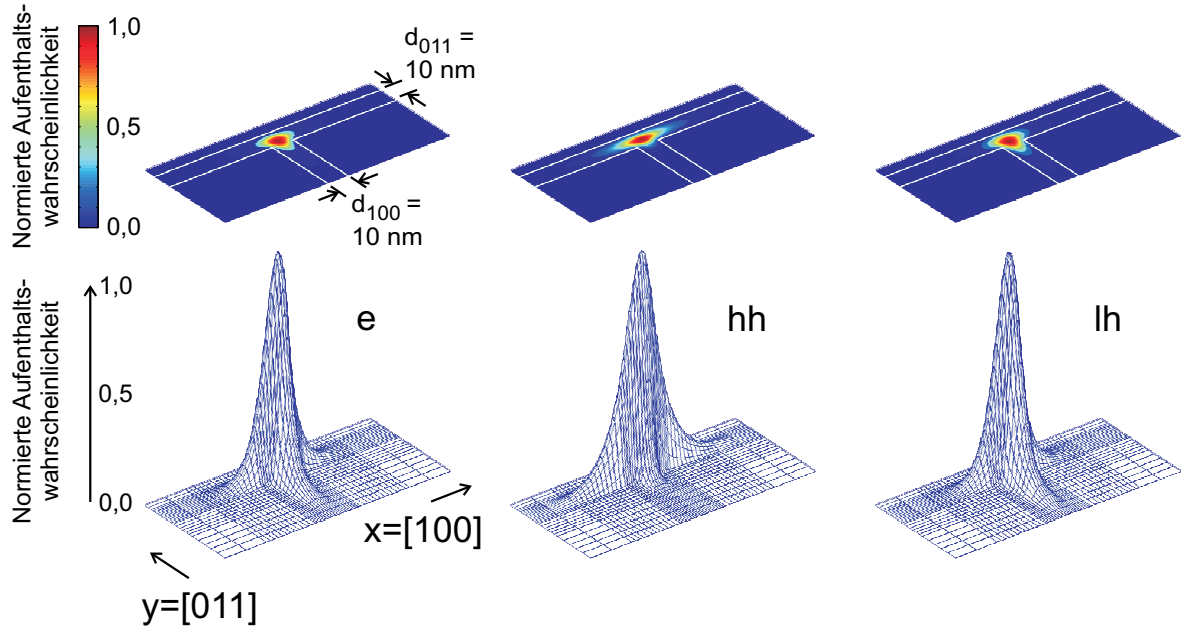


Abbildung 5: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektron (*e*), Schwerloch (*hh*) und Leichtloch (*lh*) an einer unverspannten T-förmigen Kreuzung zweier 10 nm breiter GaAs-Quantenfilme, die in $Al_{0,35}Ga_{0,65}As$ -Barrieren eingebettet sind.

In Abbildung 6 wird die zweidimensionale Darstellung wiederholt. Hier kann man den Unterschied in den Konturdiagrammen deutlich erkennen. Anders als beim Elektron breitet sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Schwerloch nicht in alle Äste der T-Kreuzung gleichermaßen aus. Diese Bevorzugung des (011)-Quantenfilms ist eine unmittelbare Konsequenz der anisotropen Lochmassen.

Dass der Effekt für das Leichtloch weniger ausgeprägt ist, kann direkt aus Tabelle 1 (Seite 38) abgelesen werden. Hier wird deutlich, dass sich die Leichtlochmassen in [100]- und [011]-Richtung wenig unterscheiden und mit der Elektronmasse vergleichbar sind. Deswegen erhält man für Elektron und Leichtloch sehr ähnliche Konturdiagramme der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten.

Neben den hier diskutierten Wellenfunktionen des Grundzustands kann es auch angeregte Zustände geben. Wieder ist zu beachten, dass jedem Eigenwert ein Subband zugeordnet ist, das die freie Bewegung entlang der Drahtachse beschreibt.

Exzitonische Effekte treten auch in eindimensionalen Strukturen auf. Die Beschreibung mit einem eindimensionalen Wasserstoff-Atommodell ist in diesem Fall nicht sinnvoll. Während im Zweidimensionalen die Singularität des Coulombpotentials einen gebundenen Elektron-Loch-Zustand erlaubt, können sich – in einem anschaulichen Bild – die auf eine Linie festgelegten Ladungsträger nicht gegenseitig umkreisen. Dies führt zu einer unendlich großen Exziton-Bindungsenergie. Rechnungen in quasi-eindimensionalen Systemen lassen jedoch eine weitere Erhöhung der Exziton-Bindungsenergie erwarten, wie das Einsetzen von $1 < \delta < 2$ in Gleichung (9) zeigt.

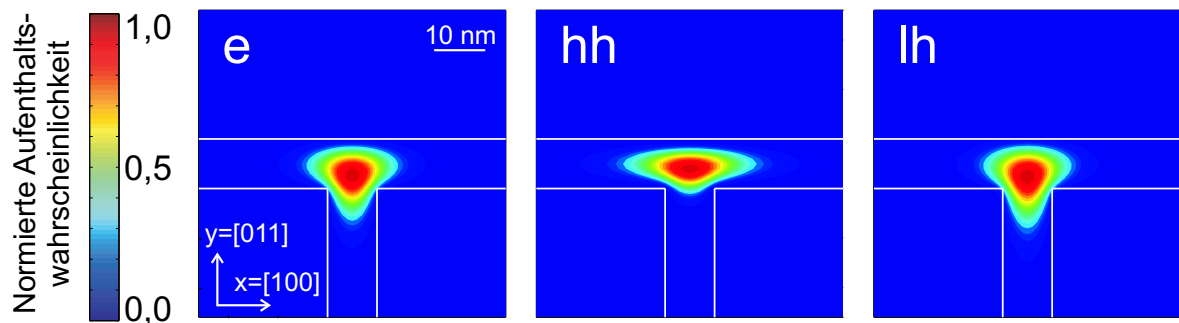


Abbildung 6: Konturdiagramm der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektron (*e*), Schwerloch (*hh*) und Leichtloch (*lh*) an einer unverspannten T-Kreuzung zweier 10 nm breiter GaAs-Quantenfilme, die in $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barrieren eingebettet sind.

Vorteile eindimensionaler Systeme

Auf den letzten Seiten wurde ausgehend vom dreidimensionalen Volumenmaterial die freie Beweglichkeit der Ladungsträger auf zwei bzw. eine Dimension beschränkt. Durch das Einschlusspotential ergeben sich quantisierte Zustände mit zugehörigen Quantenzahlen n_x (2d) sowie n_x und n_y (1d). In Abbildung 7 kann man sehen, dass diesen jeweils ein Subband im reziproken Raum zugeordnet ist. Die Parabeln der freien Bewegung liegen entlang der Richtungen, in denen das System nicht auf die Dicke d eingeschränkt wurde. Aus den Dispersionen kann die reduzierte Zustandsdichte $Z(E)$ abgeleitet werden, die so definiert ist, dass $Z(E) dE$ die Anzahl der Zustände pro Volumen im Energieintervall $[E; E + dE]$ angibt. Je nach Dimension weist $Z(E)$ einen unterschiedlichen Verlauf auf [Kel95]. Die für parabolische Bänder wurzelförmige Abhängigkeit der reduzierten Zustandsdichte von der Energie wird beim Übergang vom drei- zum zweidimensionalen Fall durch eine abschnittsweise konstante Funktion ersetzt. Eindimensionale Systeme besitzen $\frac{1}{\sqrt{E}}$ -Singularitäten.

Da die reduzierte Zustandsdichte wesentlichen Einfluss auf die optischen Eigenschaften hat, werden insbesondere für niedrigdimensionale Lasersysteme Qualitätsfortschritte

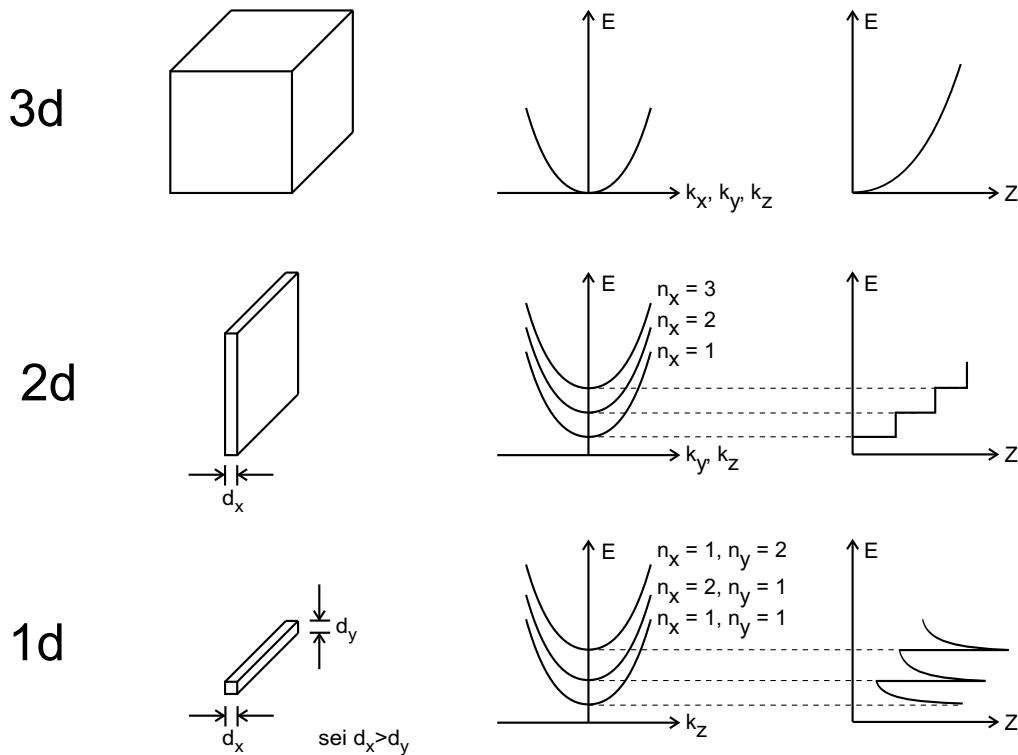


Abbildung 7: Schematische Darstellung der Subbänder und der reduzierten Zustandsdichten Z in drei-, zwei- und eindimensionalen (3d, 2d, 1d) Systemen.

erwartet. Dies betrifft Verbesserungen der optischen Nichtlinearitäten [Sch87] ebenso wie erhöhte differentielle Gewinne und schmalere Gewinnspektren [Ara86]. Durch das verkleinerte Volumen des optisch aktiven Materials bei eindimensionalen Strukturen sinkt der Schwellstrom bei gleichzeitig reduzierter Temperaturabhängigkeit [Ara82]. Grundsätzlich kommt es beim Übergang zur niedrigeren Dimension zu einer Konzentration der Oszillatorstärke [Wei91], wie von Akiyama *et al.* für T-förmige Quantendrähte nachgewiesen wurde [Aki96a]. Weiterhin kann in Anwendungen die bereits erwähnte Erhöhung der Exziton-Bindungsenergie im Vergleich zu drei- und zweidimensionalen Systemen hilfreich sein.

2.4 Einschlussenergie

Um nun die Vorteile des eindimensionalen Systems voll nutzen zu können, ist es wichtig, dass die Quantendrahtzustände gegenüber denen der konstituierenden Quantenfilme energetisch genügend weit abgesenkt sind. Diese Differenz wird (effektive) Einschlussenergie (engl.: confinement energy) E_c genannt. Sie bestimmt die Temperatur, oberhalb derer aufgrund thermischer Anregung eine Mischung aus ein- und zweidimensionalen Eigenschaften auftritt.

Für ungebundene Elektron-Loch-Paare, also ohne Berücksichtigung der Exziton-Bindungsenergie, beträgt der Wert der Einschlussenergie E_c^{eh} :

$$E_c^{eh} = \left[\min \left(E_e^{(100)}, E_e^{(011)} \right) - E_e^{\text{QWR}} \right] + \left[E_{hh}^{\text{QWR}} - \max \left(E_{hh}^{(100)}, E_{hh}^{(011)} \right) \right].$$

Diese Formel ergibt sich – unter der Voraussetzung, dass das Schwerloch das energetisch höher liegende ist – aus der niedrigst möglichen separaten Anregung von Elektron und Loch. Vom Quantendraht gelangt das Elektron dabei in den (100)- oder (011)-Quantenfilm abhängig davon, welcher der beiden die kleinere Grundzustandsenergie besitzt. Unabhängig davon wechselt das Loch in den (auf der positiven Energieskala) höchstliegenden quantisierten Zustand der beiden Quantenfilme. Die Eigenenergien $E_e^{(100)/(011)}$ und $E_{hh}^{(100)/(011)}$ im (100)- und (011)-Quantenfilm bzw. E_e^{QWR} und E_{hh}^{QWR} im Quantendraht ergeben sich für Elektronen und Löcher aus den Gleichungen (6) und (7) bzw. (10) und (11).

Ein anderer Zusammenhang folgt für die Einschlussenergie, wenn man Exzitonen mit berücksichtigt. Grundsätzlich sind verschiedene Anregungsformen denkbar. Beispielsweise könnte das Quasiteilchen zunächst in seine Bestandteile dissoziieren. Die Ladungsträger würden dann nach obiger Gleichung vom Quantendraht in den jeweils

energetisch günstigeren Quantenfilm wechseln und dort gegebenenfalls ein neues gebundenes Elektron-Loch-System bilden.

Aufgrund der zuvor diskutierten hohen Exziton-Bindungsenergien im Eindimensionalen $E_{B,X}^{1d}$ ist jedoch ein anderer Anregungstyp energetisch vorteilhafter. Hier bleibt das Quasiteilchen erhalten und geht als Ganzes vom Quantendraht in denjenigen Quantenfilm über, der die geringere Übergangsenergie ($E_e - E_{hh}$) besitzt. Bei diesem Vorgang reduziert sich der Wert der Exziton-Bindungsenergie auf $E_{B,X}^{2d}$, so dass für die Einschlussenergie E_c folgende Gleichung gültig ist:

$$E_c = \min \left[\left(E_e^{(100)} - E_{hh}^{(100)} \right), \left(E_e^{(011)} - E_{hh}^{(011)} \right) \right] - \left(E_e^{\text{QWR}} - E_{hh}^{\text{QWR}} \right) + \left(E_{B,X}^{1d} - E_{B,X}^{2d} \right).$$

Bedingt durch die Vorteile von eindimensionalen Systemen ist die Optimierung der Einschlussenergie ein zentrales Thema bei den Untersuchungen an T-förmigen Quantendrähten. Derartige Strukturen waren im Jahr 1985 von Chang *et al.* vorgeschlagen [Cha85] und 1992 von Goñi *et al.* erstmals realisiert worden [Gon92]. Schon 1990 hatten Gershoni *et al.* über Quantendrähte, die durch Verspannungen entstehen, berichtet [Ger90]. Während diese eine Einschlussenergie von 21 meV besaßen, zeigten die ersten T-förmigen Quantendrähte [Gon92] ein E_c von 28 meV. Schon kurz darauf wurde 1993 von Wegscheider *et al.* stimulierte Emission aus dem niedrigsten Exziton-Zustand in Quantendrähten beobachtet [Weg93, Weg94]. Die Einschlussenergie betrug hier 17 meV. Für die Exziton-Bindungsenergie in diesen $7 \times 7 \text{ nm}^2$ großen GaAs-Quantendrähten innerhalb einer $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barriere konnte ein Wert von 17 meV ermittelt werden.

Wichtige Eckpunkte im Lauf des Optimierungsprozesses für T-förmige Strukturen sind in Abbildung 8 aufgetragen. Im Jahr 1996 erzielten Someya *et al.* mit 5 nm breiten GaAs-Quantendrähten und AlAs-Barrieren eine Einschlussenergie von 38 meV [Som95a, Aki96b, Som96]. Dieser Wert wurde schon bald von Langbein *et al.* mit 54 meV über-

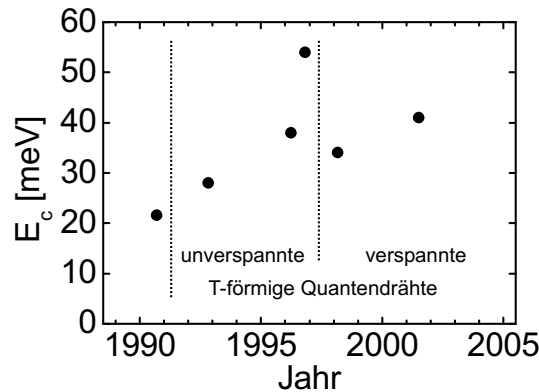


Abbildung 8: Eckpunkte der historischen Entwicklung der Einschlussenergien.

troffen [Lan96, Gis96]. In diesem Fall entstanden die Quantendrähte an einer stark asymmetrischen Kreuzung eines 12 nm breiten $\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,86}\text{As}$ -Quantenfilms mit einer 2,5 nm dicken GaAs-Lage.

Später standen verspannte Systeme im Zentrum des Interesses. Quantendrähte, die sich an der T-förmigen Kreuzung zweier 3,7 und 3,4 nm breiter, von $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barrieren umgebener $\text{In}_{0,17}\text{Ga}_{0,83}\text{As}$ -Lagen bildeten, wiesen eine Einschlussenergie von 34 meV auf [Aki98, Yos98]. Eine Verbesserung auf 41 meV brachte die Verwendung von quaternärem Indiumaluminiumgalliumarsenid ($\text{In}_{0,10}\text{Al}_{0,18}\text{Ga}_{0,72}\text{As}$). Die Einschlussenergie wurde am Schnittpunkt einer 17,9 nm dicken Lage dieses Materials mit einem 3,5 nm breiten GaAs-Quantenfilm erzielt [Jen01].

Ein wichtiges Anliegen der vorliegenden Arbeit stellt die weitere Verbesserung von E_c dar. Aufgrund der fortgeschrittenen Optimierung der Strukturparameter war es zum Erreichen dieses Ziels nötig, ein neues Konzept für die Quantendrahtbildung zu verfolgen, das in Kapitel 3.3 vorgestellt wird. Der entscheidende Unterschied zu herkömmlichen Systemen ist, dass die eingebauten Verspannungen nicht nur wie bisher unterstützend genutzt werden. Im Gegensatz zu den oben diskutierten Strukturen entstehen die Quantendrähte hier ausschließlich durch Verspannungseffekte. Damit wird die Grundlage für eine Laserstruktur geschaffen, die auf einem einzelnen verspannungsinduzierten Quantendraht beruht. Eine Erweiterung des verfolgten Konzepts auf nulldimensionale Quantenpunkte ist möglich. Im Rahmen dieser Arbeit werden jedoch ausschließlich Quantendrahtsysteme behandelt. Das folgende Kapitel dient dazu, die für die Verspannungseffekte wichtigen Grundlagen der Elastizitätstheorie vorzustellen.

2.5 Elastizitätstheorie

Ausgehend von der Deformation eines Festkörpers führt dieser Abschnitt im Rahmen der Kontinuumsmechanik den Verzerrungs-, den Elastizitäts- und den Spannungstensor ein. Es wird außerdem gezeigt, wie sich der Gleichgewichtszustand im verspannten Kristall berechnen lässt.

Deformationen

Form und Volumen eines Festkörpers können sich unter dem Einfluss von Kräften ändern. Eine Verformung bewirkt eine Verschiebung eines Körperpunkts von seinem ur-

springlichen Platz, der durch den Vektor \vec{x} beschrieben wird. Der Unterschied zwischen der neuen Position \vec{x}^n und der alten Lage wird als Auslenkungsvektor $\vec{u}(\vec{x})$ bezeichnet:

$$\vec{u}(\vec{x}) = \vec{x}^n - \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1^n \\ x_2^n \\ x_3^n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Sind für alle Positionen die zugehörigen Auslenkungsvektoren bekannt, ist die Deformation des Körpers vollständig beschrieben. Die oben eingeführte, bei Summationen günstigere numerische Notation $\{1,2,3\}$ wird bis zum Ende von Kapitel 2 für die Kristallachsen $\{\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}\} = \{[100], [010], [001]\}$ verwendet.

Mit der Verformung ändert sich auch der Abstand zweier Körperpunkte \vec{x}_A und \vec{x}_B . Vor der Deformation gilt für den Verbindungsvektor \vec{d} :

$$\vec{d} = \vec{x}_B - \vec{x}_A. \quad (22)$$

Danach sind die beiden Punkte durch den Vektor

$$\vec{d}^n = \vec{x}_B^n - \vec{x}_A^n = [\vec{x}_B + \vec{u}(\vec{x}_B)] - [\vec{x}_A + \vec{u}(\vec{x}_A)] = \vec{d} + [\vec{u}(\vec{x}_A + \vec{d}) - \vec{u}(\vec{x}_A)] \quad (23)$$

verbunden, wobei für die Umformungen die Gleichungen (21) und (22) verwendet wurden.

Beschränkt man sich von nun an auf infinitesimal benachbarte Punkte, kann unter Ausnutzung der Taylorentwicklung von Feldern

$$u_i(\vec{x} + \vec{d}) \approx u_i(\vec{x}) + d_1 \frac{\partial u_i}{\partial x_1} + d_2 \frac{\partial u_i}{\partial x_2} + d_3 \frac{\partial u_i}{\partial x_3}$$

Gleichung (23) geschrieben werden als:

$$\begin{pmatrix} d_1^n \\ d_2^n \\ d_3^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} d_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + d_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + d_3 \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \\ d_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + d_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + d_3 \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \\ d_1 \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + d_2 \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + d_3 \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Für das Quadrat des Punktabstands $|\vec{d}|^2$ galt vor der Verformung:

$$|\vec{d}|^2 = d_1^2 + d_2^2 + d_3^2.$$

Aus Gleichung (24) ergibt sich der neue Wert nach der Deformation zu

$$\begin{aligned} |\vec{d}^n|^2 &= d_1^2 + 2d_1 \left(d_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + d_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + d_3 \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) + \mathcal{O}(2) + \\ &+ d_2^2 + 2d_2 \left(d_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + d_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + d_3 \frac{\partial u_2}{\partial x_3} \right) + \mathcal{O}(2) + \\ &+ d_3^2 + 2d_3 \left(d_1 \frac{\partial u_3}{\partial x_1} + d_2 \frac{\partial u_3}{\partial x_2} + d_3 \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right) + \mathcal{O}(2), \end{aligned}$$

wobei der Ausdruck $\mathcal{O}(2)$ jeweils für einen vernachlässigbaren Term zweiter Ordnung steht.

Für den Unterschied in den quadratischen Abständen kann dann geschrieben werden:

$$|\vec{d}^n|^2 - |\vec{d}|^2 = 2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 d_i d_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}.$$

Verzerrungstensor

Obige Gleichung kann unter Ausnutzung der Symmetrien auf der rechten Seite wie folgt umgeschrieben werden:

$$\begin{aligned} |\vec{d}^n|^2 - |\vec{d}|^2 &= 2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 d_i d_j \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \\ &= 2 \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{ij} d_i d_j. \end{aligned}$$

Bei der Umformung wurde im letzten Schritt der Verzerrungstensor (engl.: strain tensor) ε eingeführt:

$$\varepsilon_{ij} := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (25)$$

Da u_i und x_i die Dimension einer Länge haben, ist der Verzerrungstensor dimensionslos. Seine Elemente ε_{ij} können abhängig von der Position \vec{x} variieren. Der Verzerrungstensor ist symmetrisch. Diese wichtige Eigenschaft unterscheidet ihn vom Verformungstensor, der weiter unten eingeführt wird. Positive Hauptdiagonalelemente ε_{ii} kennzeichnen eine Dehnung entlang der betreffenden Koordinatenachse i , während negative Werte einer Kontraktion entsprechen. Durch derartige Verformungen ändern sich also die Längen des betrachteten Volumenelements, während die Winkel unbeeinflusst bleiben. Gerade das Gegenteil trifft für die Elemente außerhalb der Hauptdiagonale zu: Sie beschreiben Scherungen, bei denen sich die Winkel ändern und die Längen konstant bleiben.

Als symmetrische, reelle 3×3 -Matrix ist ε diagonalisierbar, d. h. es gibt eine orthogonale Transformation R , so dass $\varepsilon^D := R^T \varepsilon R$ die Form einer Diagonalmatrix annimmt. Die Elemente in der Hauptdiagonale von ε^D sind die Eigenwerte von ε . Generell wird die Summe der Diagonalelemente einer Matrix ε als Spur $\text{Sp}(\varepsilon)$ bezeichnet, welche unter orthogonalen Transformationen invariant ist:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(\varepsilon^D) &= \sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ii}^D = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 R_{ij}^T \varepsilon_{jk} R_{ki} = \\ &= \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{jk} \underbrace{\sum_{i=1}^3 R_{ji} R_{ki}}_{\delta_{j,k}} = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{jj} = \text{Sp}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (26)$$

Hier sind die R_{ij} die Elemente von R . Physikalisch beschreibt die Spur des Verzerrungstensors die hydrostatische Verzerrung ε_{hyd} :

$$\varepsilon_{\text{hyd}} := \text{Sp}(\varepsilon) = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}. \quad (27)$$

Im Hauptachsensystem des Verzerrungstensors kann man leicht erkennen, dass die Spur $\text{Sp}(\varepsilon)$ die relative Änderung $\frac{V^n - V}{V}$ des Volumens V angibt. Das Volumenelement werde durch die Vektoren

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

aufgespannt. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \frac{V^n - V}{V} &= \frac{V^n}{V} - 1 \\ &= \left[\det \begin{pmatrix} a_1(1 + \varepsilon_{11}) & b_1(1 + \varepsilon_{11}) & c_1(1 + \varepsilon_{11}) \\ a_2(1 + \varepsilon_{22}) & b_2(1 + \varepsilon_{22}) & c_2(1 + \varepsilon_{22}) \\ a_3(1 + \varepsilon_{33}) & b_3(1 + \varepsilon_{33}) & c_3(1 + \varepsilon_{33}) \end{pmatrix} : \det \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \right] - 1 \\ &= \left[(1 + \varepsilon_{11})(1 + \varepsilon_{22})(1 + \varepsilon_{33}) \det \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} : \det \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \right] - 1 \\ &= \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} + \mathcal{O}(2) + \mathcal{O}(3) \\ &\approx \text{Sp}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (28)$$

Der Verzerrungstensor ε darf nicht mit dem Verformungstensor (engl.: deformation tensor) ν verwechselt werden, der wie folgt definiert ist:

$$\nu_{ij} := \frac{\partial u_i}{\partial x_j}.$$

Über den Rotationstensor ω wird der Zusammenhang zwischen Verzerrungstensor und Verformungstensor hergestellt:

$$\omega_{ij} := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

Damit gilt:

$$\nu_{ij} = \varepsilon_{ij} + \omega_{ij}.$$

Der Rotationstensor beschreibt reine Drehungen und ist für die behandelten Probengeometrien nicht von Bedeutung. Wichtig ist hier der Verzerrungstensor, dessen Elemente die relative Lage der Körperpunkte ändern. Generell werden im Rahmen dieser Arbeit beim Vorliegen von Verzerrungen auch Bezeichnungen wie „verspannte Systeme“ und „verspannungsinduzierte Quantendrähte“ verwendet.

Elastizitäts- und Spannungstensor

Das Hooke'sche Gesetz nimmt in der Elastizitätstheorie folgende Gestalt an:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \quad (29)$$

Die 81 Elemente des Elastizitätstensors C_{ijkl} (oft auch „Tensor der elastischen Konstanten“ genannt) verknüpfen so die neun Elemente des Verzerrungstensors ε mit den neun Elementen des Spannungstensors (engl.: stress tensor) σ .

Mechanische Spannung wird durch das Wirken einer Kraft auf eine Fläche erzeugt und in der Einheit $[\text{N}/\text{m}^2]$ gemessen. Die Kraft, die auf einen Teilbereich eines Körpers wirkt, kann sowohl von außen kommen als auch von anderen Teilbereichen ausgeübt werden.

Aufgrund der Symmetrieeigenschaft $\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}$ ist C_{ijkl} invariant unter der Indexvertauschung $k \leftrightarrow l$. Aus der noch folgenden Gleichung (31) ergibt sich die Invarianz unter $ij \leftrightarrow kl$, da diese Vertauschung dort die Summe auf der rechten Seite nicht ändert. Durch Kombination dieser Permutationen erhält man:

$$C_{ijkl} = C_{ijlk} = C_{jikl} = C_{jilk} = C_{klij} = C_{klji} = C_{lkij} = C_{lkji}.$$

Damit wird die Anzahl der unabhängigen Elemente des vierstufigen Tensors C_{ijkl} auf 21 reduziert. Abhängig vom Kristallsystem kann diese Zahl weiter verringert werden. Für das in dieser Arbeit betrachtete kubische Kristallsystem gilt [Lan70]:

$$\begin{aligned} C_{1111} &= C_{2222} = C_{3333}, \\ C_{1122} &= C_{1133} = C_{2233}, \\ C_{1212} &= C_{1313} = C_{2323}. \end{aligned} \quad (30)$$

Alle weiteren Elemente, bei denen mindestens ein Index in einer ungeraden Anzahl auftritt, sind identisch null. Die Zahlenwerte für C_{ijkl} werden in der Einheit $[\text{N}/\text{m}^2]$ angegeben. Sie sind materialspezifisch und liegen für die wichtigsten Halbleiterverbindungen tabellarisch vor.

Aus den Symmetrieeigenschaften des Elastizitätstensors erhält man für den Spannungstensor:

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}.$$

Gleichgewichtszustand

Allgemein gilt für die freie Energie pro Volumeneinheit F eines verspannten Kristalls [Lan70]:

$$F = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl}. \quad (31)$$

Die Maßeinheit für F ist dabei $[\text{J}/\text{m}^3]$. Mit den Gleichungen (30) kann man für kubische Kristalle vereinfacht schreiben:

$$\begin{aligned} F = & \frac{1}{2} C_{1111} (\varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2 + \varepsilon_{33}^2) + C_{1122} (\varepsilon_{11} \varepsilon_{22} + \varepsilon_{11} \varepsilon_{33} + \varepsilon_{22} \varepsilon_{33}) + \\ & + 2C_{1212} (\varepsilon_{12}^2 + \varepsilon_{13}^2 + \varepsilon_{23}^2). \end{aligned}$$

Von besonderem Interesse ist der Gleichgewichtszustand, der unter dem Einfluss mechanischer Spannungen eingenommen wird. Hierzu muss man die elastische Energie der Verzerrung $\int F dV$ minimieren. Mit den Mitteln der Variationsrechnung kann gezeigt werden, dass dieses Minimum auftritt, wenn für alle $i = 1, 2, 3$ der Ausdruck

$$\sum_{m=1}^3 \delta_{m,j} \frac{\partial}{\partial x_m} \left(\frac{\partial F}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) = 0$$

gilt, wobei keine äußeren Kräfte berücksichtigt werden. Unter Zuhilfenahme der Gleichungen (29) und (31) lässt sich obiger Ausdruck weiter vereinfachen:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^3 \delta_{m,j} \frac{\partial}{\partial x_m} \left(\frac{\partial \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \right)}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) &= 0 \quad (i = 1, 2, 3) \\ \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_j} \underbrace{\left(\sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \right)}_{\sigma_{ij}, \text{ siehe (29)}} &= 0 \quad (i = 1, 2, 3) \\ \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} &= 0 \quad (i = 1, 2, 3). \quad (32) \end{aligned}$$

Mit der letzten Gleichung, die im Rahmen der Kontinuumsmechanik gewonnen wurde, kann man nun die gesuchten Auslenkungen $\vec{u}(\vec{x})$ auch auf einem diskreten Gitter für alle N Gitterpunkte bestimmen: Da \vec{u} ein Vektor mit drei Komponenten ist, gibt es insgesamt $3N$ Unbekannte. Diese fließen über Gleichung (25) in den ortsabhängigen Verzerrungstensor ein, der über das Hooke'sche Gesetz (29) mit dem Spannungstensor σ verknüpft ist. Da Gleichung (32) für $i = 1, 2, 3$ und alle N Gitterpunkte erfüllt sein muss, sind insgesamt $3N$ Bedingungen gegeben, die eine eindeutige Bestimmung des Vektorfelds $\vec{u}(\vec{x})$ erlauben. Dazu muss jedoch ein lineares Gleichungssystem der Dimension $3N \times 3N$ gelöst werden, da über die partiellen Ableitungen benachbarte Gitterpunkte miteinander in Wechselwirkung stehen.

Beispiel

Für einfache Geometrien kann man die resultierenden Verzerrungen auch direkt angeben. Wird beispielsweise ein dünner Film eines Materials mit der Gitterkonstante a auf ein Substrat mit Gitterkonstante a_0 in einer beliebigen \hat{x} -Richtung gewachsen, nimmt der Film bei pseudomorphem Wachstum lateral die Gitterkonstante des Substrats an. In der Filmebene (ε_{\parallel}) sind dann die Komponenten $\varepsilon_{\hat{y}\hat{y}}$ und $\varepsilon_{\hat{z}\hat{z}}$ des Verzerrungstensors gleich der Gitterfehlانpassung f und es gilt:

$$\varepsilon_{\parallel} := \varepsilon_{\hat{y}\hat{y}} = \varepsilon_{\hat{z}\hat{z}} = f = \frac{a_0 - a}{a}. \quad (33)$$

Der Film unterliegt dabei einer biaxialen Verzerrung. Ist diese zum Beispiel kompressiv ($\varepsilon_{\parallel} < 0$), folgt innerhalb der linearen Elastizitätstheorie aufgrund des Poissoneffekts eine tensile Verspannung senkrecht zur Filmebene (ε_{\perp}). Für die beiden in dieser Arbeit wichtigen Wachstumsrichtungen [100] und [011] ergeben sich folgende Ausdrücke [Wal89]:

$$\varepsilon_{\perp}^{[100]} := \varepsilon_{\hat{x}\hat{x}}^{[100]} = -\varepsilon_{\parallel} \frac{2C_{1122}}{C_{1111}}, \quad (34)$$

$$\varepsilon_{\perp}^{[011]} := \varepsilon_{\hat{x}\hat{x}}^{[011]} = -\varepsilon_{\parallel} \frac{C_{1111} + 3C_{1122} - 2C_{1212}}{C_{1111} + C_{1122} + 2C_{1212}}. \quad (35)$$

Setzt man $C_0 = 2C_{1212} + C_{1122} - C_{1111}$, kann Gleichung (35) umgeschrieben werden:

$$\varepsilon_{\perp}^{[011]} = -\varepsilon_{\parallel} \frac{2C_{1122} - \frac{C_0}{2}}{C_{1111} + \frac{C_0}{2}}.$$

Für einen isotropen Festkörper gilt stets $C_0 = 0$, so dass sich die Richtungsinvarianz auch in ε_{\perp} widerspiegelt, wie der Vergleich mit Gleichung (34) zeigt. Hingegen ist für die meisten Halbleiter C_0 positiv [Gru98].

Im diskutierten Beispiel sorgt das pseudomorphe Wachstum für eine biaxiale Spannung σ_b . Allgemein kann man diese in die Summe aus hydrostatischer und uniaxialer Spannung $\sigma_{\text{hyd}} + \sigma_u$ zerlegen:

$$\sigma_b = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & K & 0 \\ 0 & 0 & K \end{pmatrix} = \sigma_{\text{hyd}} + \sigma_u = \begin{pmatrix} K & 0 & 0 \\ 0 & K & 0 \\ 0 & 0 & K \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -K & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Hier steht K für die einwirkende Kraft pro Fläche.

Voigt'sche Notation

In der Literatur ist neben der bis jetzt verwendeten Schreibweise oft die Darstellung mit kontrahierten Indizes nach Voigt zu finden [Lim94]. Der Übergang zwischen den beiden Notationen geschieht nach folgendem Muster:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} C_{1.} \\ C_{2.} \\ C_{3.} \\ C_{4.} \\ C_{5.} \\ C_{6.} \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} C_{11..} \\ C_{22..} \\ C_{33..} \\ C_{23..} \\ C_{31..} \\ C_{12..} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} C_{.1} \\ C_{.2} \\ C_{.3} \\ C_{.4} \\ C_{.5} \\ C_{.6} \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} C_{..11} \\ C_{..22} \\ C_{..33} \\ C_{..23} \\ C_{..31} \\ C_{..12} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_{23} \\ 2\varepsilon_{31} \\ 2\varepsilon_{12} \end{bmatrix}.$$

Der Faktor 2 vor den Nichtdiagonalelementen des Verzerrungstensors sorgt dafür, dass man das Hooke'sche Gesetz (29) in Matrix-Vektor-Notation schreiben kann:

$$\sigma_i = \sum_{j=1}^6 C_{ij} \varepsilon_j.$$

Die Darstellung des Elastizitätstensors mit kontrahierten Indizes hat jedoch den Nachteil, dass C dann nicht mehr die Transformationseigenschaften eines Tensors hat.

Im Rahmen der linearen Elastizitätstheorie hängen für isotrope Kristalle die Elastizitätskonstanten C_{11} und C_{12} in folgender Weise mit dem Schermodul μ und der dimensionslosen Poissonzahl ν zusammen [Ada94, Bha93]:

$$\mu = \frac{1}{2} (C_{11} - C_{12}) \quad \text{und} \quad \nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}.$$

2.6 Verschiebung und Aufspaltung der Bänder

Nachdem im letzten Kapitel gezeigt wurde, wie sich die Auslenkungen $\vec{u}(\vec{x})$ durch Lösen von Gleichung (32) berechnen lassen, erläutert der folgende Abschnitt den Einfluss der Verspannungen auf die Lage der Leitungs- und Valenzbandkanten.

Da alle in der vorliegenden Arbeit relevanten Halbleiter in der Zinkblendestruktur kristallisieren, werden die Bandverschiebungen und -aufspaltungen nur für diesen Fall dargestellt. Zunächst steht das Leitungsband im Mittelpunkt der Diskussion. Hier liefert die störungstheoretische Behandlung der Verspannungen (im Kristallsystem) für den Hamiltonoperator einen zusätzlichen Term H_ε^α [Yup96]:

$$\begin{aligned}
H_\varepsilon^\alpha &= \Xi_d^\alpha \text{Sp}(\varepsilon) + \Xi_u^\alpha (\vec{k} \cdot \varepsilon \cdot \vec{k}) \\
&= \Xi_d^\alpha \text{Sp}(\varepsilon) + \Xi_u^\alpha \left(\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 k_i \varepsilon_{ij} k_j \right) \\
&= \left(\Xi_d^\alpha + \frac{1}{3} \Xi_u^\alpha \right) \text{Sp}(\varepsilon) + \Xi_u^\alpha \left[\left(\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 k_i \varepsilon_{ij} k_j \right) - \frac{1}{3} \text{Sp}(\varepsilon) \right]. \quad (36)
\end{aligned}$$

Dabei steht $\alpha = \Gamma, X, L$ für den Ort im reziproken Raum, an dem die Lage des Leitungsbands berechnet werden soll. Bereits in Gleichung (28) wurde gezeigt, dass $\text{Sp}(\varepsilon)$ die relative Volumenänderung beschreibt, während mit Ξ die Deformationspotentiale bezeichnet sind, die ebenso wie die letzte Umformung unten diskutiert werden.

Für den Einheitsvektor \vec{k} muss man die Richtung einsetzen, in der das untersuchte Minimum im reziproken Raum liegt. Beispielsweise befinden sich für den Halbleiter Silizium, der eine Diamantstruktur aufweist, die Minima des Leitungsbands entlang der $\langle 100 \rangle$ -Richtungen zu den X-Punkten. Aufgrund der kubischen Kristallstruktur sind diese Minima im unverspannten Zustand entartet.

Aus ähnlichen Symmetrieüberlegungen folgt auch, dass für die sechs äquivalenten Richtungen nur ein Deformationspotential Ξ_u^X ausreicht. Analoges ist für das Deformationspotential Ξ_u^L gültig, das sich auf die $\langle 111 \rangle$ -Richtungen bezieht und das wie alle Deformationspotentiale in der Einheit [eV] angegeben wird. Der Index u zeigt an, dass es sich um ein uniaxiales Deformationspotential handelt. Eine uniaxiale Spannung hat nach obiger Gleichung eine Aufspaltung der zunächst entarteten Minima zur Folge. Dies wird später anhand eines Beispiels noch genauer erläutert.

Zusätzlich zur Aufspaltung kommt es auch zu einer Verschiebung der Bänder. Diese rührt von der relativen Volumenänderung her, die nach Gleichung (28) gleich der Spur des Verzerrungstensors ist. Das entsprechende Deformationspotential wird mit Ξ_d bezeichnet. Der Index d verweist auf den erweiterten Ausdruck „Ausdehnungs-Deformationspotential“ (engl.: dilatation). Die im letzten Schritt erfolgte Addition und Subtraktion des Terms $\frac{1}{3} \Xi_u^\alpha \text{Sp}(\varepsilon)$ sorgt dafür, dass die Aufspaltung $\Delta E_{c,u}^\alpha$ relativ zum neuen Schwerpunkt des Leitungsbands $E_{c,n,cm}^\alpha$ angegeben wird.

Mit Hilfe von Abbildung 9 sollen die Zusammenhänge noch einmal verdeutlicht werden. Ohne Verspannung liegt die Leitungsbandkante am Punkt α bei der Energie $E_{c,0}^\alpha$. Wegen der Entartung der Bänder gilt $E_{c,0}^\alpha = E_{c,0,cm}^\alpha$. Durch die Verspannung liegt der neue Schwerpunkt energetisch um $\Delta E_{c,cm}^\alpha = \left(\Xi_d^\alpha + \frac{1}{3} \Xi_u^\alpha \right) \text{Sp}(\varepsilon)$ verschoben bei $E_{c,n,cm}^\alpha$. Für

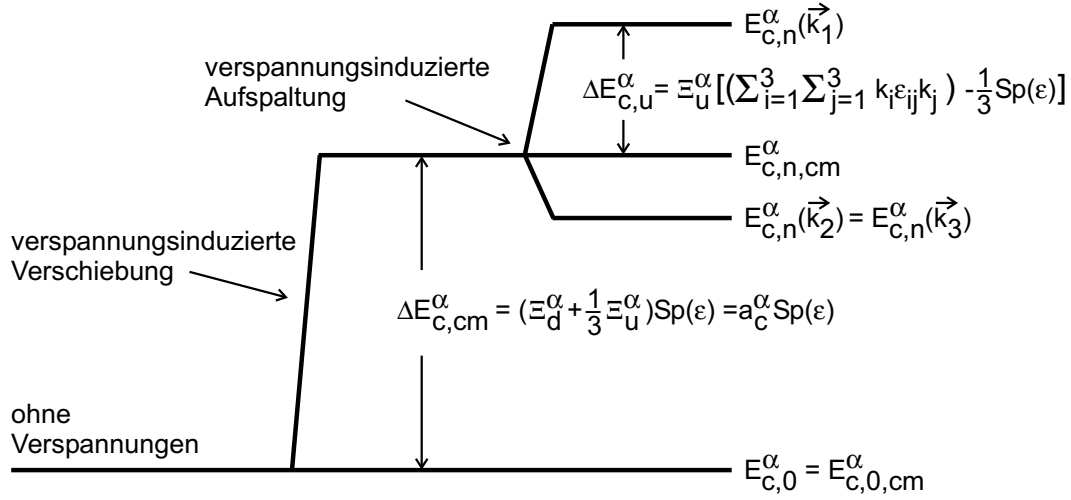


Abbildung 9: Verschiebung und Aufspaltung des Leitungsbands durch Verspannungen.

den Term in Klammern findet man oft die abkürzende Schreibweise mit dem absoluten Deformationspotential des Leitungsbands a_c^α :

$$a_c^\alpha = \Xi_d^\alpha + \frac{1}{3}\Xi_u^\alpha.$$

Bezüglich des neuen Schwerpunkts $E_{c,n,cm}^\alpha$ sind die einzelnen Bänder um den Energiebetrag $\Delta E_{c,u}^\alpha$ verschoben. Da hier

$$\Delta E_{c,u}^\alpha = \Xi_u^\alpha \left[\left(\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 k_i \epsilon_{ij} k_j \right) - \frac{1}{3} \text{Sp}(\epsilon) \right]$$

gilt, kann die ursprüngliche Entartung der Bänder aufgehoben werden, also $E_{c,n}^\alpha$ richtungsabhängig sein.

Dieser Sachverhalt wird nun anhand eines einfachen Beispiels erläutert. Die Verspannung sei durch pseudomorphes Wachstum entlang der [100]-Richtung hervorgerufen. Mit $\epsilon_{\tilde{x}\tilde{x}} = \epsilon_{\hat{x}\hat{x}}^{[100]} \stackrel{(34)}{=} \epsilon_\perp^{[100]}$, $\epsilon_{\tilde{y}\tilde{y}} = \epsilon_{\hat{y}\hat{y}} \stackrel{(33)}{=} \epsilon_\parallel$ und $\epsilon_{\tilde{z}\tilde{z}} = \epsilon_{\hat{z}\hat{z}} \stackrel{(33)}{=} \epsilon_\parallel$ folgt dann aus obiger Gleichung für die Verschiebungen der Minima, die in X-Richtung liegen:

$$\begin{aligned} \vec{k}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} &\Rightarrow \Delta E_{c,u}^{X[100]} = \Xi_u^X \left[\epsilon_{\tilde{x}\tilde{x}} - \frac{1}{3} (\epsilon_{\tilde{x}\tilde{x}} + \epsilon_{\tilde{y}\tilde{y}} + \epsilon_{\tilde{z}\tilde{z}}) \right] = \Xi_u^X \left(\frac{2}{3} \epsilon_\perp^{[100]} - \frac{2}{3} \epsilon_\parallel \right), \\ \vec{k}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} &\Rightarrow \Delta E_{c,u}^{X[010]} = \Xi_u^X \left[\epsilon_{\tilde{y}\tilde{y}} - \frac{1}{3} (\epsilon_{\tilde{x}\tilde{x}} + \epsilon_{\tilde{y}\tilde{y}} + \epsilon_{\tilde{z}\tilde{z}}) \right] = \Xi_u^X \left(\frac{1}{3} \epsilon_\parallel - \frac{1}{3} \epsilon_\perp^{[100]} \right), \\ \vec{k}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} &\Rightarrow \Delta E_{c,u}^{X[001]} = \Xi_u^X \left[\epsilon_{\tilde{z}\tilde{z}} - \frac{1}{3} (\epsilon_{\tilde{x}\tilde{x}} + \epsilon_{\tilde{y}\tilde{y}} + \epsilon_{\tilde{z}\tilde{z}}) \right] = \Xi_u^X \left(\frac{1}{3} \epsilon_\parallel - \frac{1}{3} \epsilon_\perp^{[100]} \right). \end{aligned}$$

Da diese Aufspaltungen bezüglich des Schwerpunkts angegeben sind, ist ihre Summe identisch null.

Interessiert man sich ausschließlich für die Lage des Leitungsbands am Γ -Punkt, dann ist nur das absolute Deformationspotential a_c^Γ von Bedeutung, da dort das uniaxiale Deformationspotential Ξ_u^Γ verschwindet:

$$\Xi_u^\Gamma = 0 \quad \Rightarrow \quad E_{c,n}^\Gamma - E_{c,0}^\Gamma = a_c^\Gamma \text{Sp}(\varepsilon).$$

Es bleibt anzumerken, dass in der Literatur Deformationspotentiale auch mit E_1^α und E_2^α bezeichnet werden, wobei folgende Identitäten gelten [Kan69]:

$$E_1^\alpha = a_c^\alpha = \Xi_d^\alpha + \frac{1}{3}\Xi_u^\alpha \quad \text{und} \quad E_2^\alpha = \Xi_u^\alpha.$$

Nach dieser ausführlichen Diskussion der Verschiebungen und Aufspaltungen im Leitungsband werden nun die wesentlichen Zusammenhänge für die Valenzbänder vorgestellt. Der Verzerrungs-Hamiltonoperator H^ε in Zinkblendestrukturen wurde hierbei von Pikus und Bir abgeleitet [Bir74]. Am Γ -Punkt ergibt sich für das Schwer- und Leichtlochband folgender Zusammenhang [Yup96]:

$$\begin{aligned} H^\varepsilon = & a_v \text{Sp}(\varepsilon) + 3b \left[\left(J_x^2 - \frac{J^2}{3} \right) \varepsilon_{\tilde{x}\tilde{x}} + \left(J_y^2 - \frac{J^2}{3} \right) \varepsilon_{\tilde{y}\tilde{y}} + \left(J_z^2 - \frac{J^2}{3} \right) \varepsilon_{\tilde{z}\tilde{z}} \right] + \\ & \sqrt{3}d [(J_{\tilde{x}}J_{\tilde{y}} + J_{\tilde{y}}J_{\tilde{x}}) \varepsilon_{\tilde{x}\tilde{y}} + (J_{\tilde{y}}J_{\tilde{z}} + J_{\tilde{z}}J_{\tilde{y}}) \varepsilon_{\tilde{y}\tilde{z}} + (J_{\tilde{z}}J_{\tilde{x}} + J_{\tilde{x}}J_{\tilde{z}}) \varepsilon_{\tilde{z}\tilde{x}}]. \end{aligned} \quad (37)$$

In obiger Gleichung wurden das absolute Deformationspotential des Valenzbands a_v und die Scherdeformationspotentiale b und d eingeführt. Dabei sind die Komponenten des Drehimpulsoperators im Kristallsystem wieder mit $J_{\tilde{x}}$, $J_{\tilde{y}}$ und $J_{\tilde{z}}$ bezeichnet. Die formale Ähnlichkeit mit dem Luttinger-Hamiltonoperator in Gleichung (12) rührt von den Symmetrieeigenschaften des Verzerrungstensors her.

Die Deformationspotentiale sorgen ebenso wie beim Leitungsband für das Verschieben und Aufspalten der Bänder. So hebt beispielsweise eine uniaxiale Spannung die Entartung von Schwer- und Leichtloch am Γ -Punkt auf [Ada94]. Beispiele für ausgewählte Spannungsgeometrien finden sich in der Literatur und sind in Referenz [Lim94] zusammengestellt. Wieder sind die unterschiedlichen Definitionen der Deformationspotentiale zu beachten.

Unter dem Einfluss von Verspannungen ändert sich auch die effektive Leichtlochmasse am Γ -Punkt [Ada94]. Dieser Effekt wurde bei den durchgeführten Simulationen vernachlässigt. Da jedoch bei der in Kapitel 3.3 präsentierten Struktur stets das Schwerlochband das energetisch höher liegende ist, ergeben sich daraus keine Einschränkungen.

Weiterhin wird im Folgenden der zusätzliche Einfluss der Verspannungen auf die Spin-Bahn-Wechselwirkung über die Änderung des Gitterpotentials vernachlässigt.

Für die absoluten Deformationspotentiale existieren verschiedene Vorzeichenkonventionen. In dieser Arbeit entsprechen positive Werte von a_c^Γ und a_v einer Verschiebung des Leitungs- und Valenzbands zu höheren Energien. Das bedeutet für die Änderung der Bandlücke ΔE_{gap} am Γ -Punkt über das absolute Deformationspotential a_{gap} :

$$a_{\text{gap}} = a_c^\Gamma - a_v \quad \text{und} \quad \Delta E_{\text{gap}} = a_{\text{gap}} \text{Sp}(\varepsilon) = (a_c^\Gamma - a_v) \text{Sp}(\varepsilon).$$

Da eine kompressive Verspannung ($\text{Sp}(\varepsilon) < 0$) physikalisch eine Vergrößerung der Bandlücke ($\Delta E_{\text{gap}} > 0$) zur Folge hat, muss für die hier gewählte Vorzeichenkonvention stets $a_c^\Gamma < a_v$ gelten.

2.7 Piezoelektrische Polarisisation

Verspannungen können – neben ihrem Einfluss auf die Lage von Valenz- und Leitungsband – eine piezoelektrische Polarisisation induzieren [Vur01], die im folgenden Abschnitt diskutiert wird. Alle in Zinkblendestruktur kristallisierenden Halbleiter gehören zur Gruppe der piezoelektrischen Materialien, da kein Inversionszentrum vorhanden ist. Die piezoelektrische Polarisisation rührt von der teilweisen Ionizität der Bindungen in III-V-Halbleitern her. Unter Einwirkung von mechanischen Spannungen kommt es zu Ladungsverschiebungen, die zu einer makroskopischen Polarisisation $\vec{P}(\vec{x})$ führen. Deren Komponenten P_i stehen über den Tensor der piezoelektrischen Konstanten e_{ijk} mit den Elementen ε_{jk} des Verzerrungstensors in folgendem Zusammenhang:

$$P_i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 e_{ijk} \varepsilon_{jk}. \quad (38)$$

Einheit der Polarisisation und der piezoelektrischen Konstanten ist $[\text{C}/\text{m}^2]$. Letztere sind invariant gegenüber der Indexvertauschung $j \leftrightarrow k$. Dies folgt aus der Symmetrie des Verzerrungstensors. So kann für die piezoelektrischen Konstanten folgende Notation mit Indexkontraktion vereinbart werden:

$$\begin{bmatrix} e_{.1} \\ e_{.2} \\ e_{.3} \\ e_{.4} \\ e_{.5} \\ e_{.6} \end{bmatrix} \leftrightarrow \begin{bmatrix} e_{.11} \\ e_{.22} \\ e_{.33} \\ e_{.23} \\ e_{.31} \\ e_{.12} \end{bmatrix}.$$

Gleichung (38) lautet nun in Matrix-Vektor-Schreibweise:

$$P_i = \sum_{j=1}^6 e_{ij} \varepsilon_j, \quad (39)$$

wobei für ε_j die Zuordnungen von Seite 26 gelten.

Wieder lässt sich unter Ausnutzung der Kristallsymmetrien die Anzahl der unabhängigen Elemente reduzieren. Für Zinkblendestrukturen ergibt sich [Vur01]:

$$e_{123} = e_{231} = e_{312} \quad \text{bzw.} \quad e_{14} = e_{25} = e_{36}.$$

Einsetzen in die Gleichungen (38) und (39) führt zu:

$$\vec{P}(\vec{x}) = 2e_{123} \begin{pmatrix} \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix} = 2e_{14} \begin{pmatrix} \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{12} \end{pmatrix}. \quad (40)$$

Bei der Verwendung des Parameters e_{14} muss darauf geachtet werden, wie dieser definiert ist. In der Literatur ist neben der oben angegebenen Zuordnung oft auch $e_{14} = 2e_{123}$ vorzufinden, so dass der explizite Faktor 2 auf der rechten Seite in obiger Gleichung verschwindet.

Zusätzlich muss man beachten, dass die Richtung von \vec{P} von der Definition der Kristallachsen abhängt. Wird das Koordinatensystem – bei festgehaltener Zinkblendestruktur – einer Inversion unterworfen, dann ändert die piezoelektrische Konstante ihr Vorzeichen. Es kommt also auf die Festlegung der positiven [111]-Richtung an. Nach dem ANSI/IEEE-Standard 176-1987 sind die piezoelektrischen Konstanten stets positiv und die Kristallrichtungen müssen entsprechend definiert werden [Mee96]. Dies kann bei Anwendung auf Heterostrukturen zu Problemen führen, da die Kristallorientierung für alle Schichten einheitlich sein soll. Deswegen wird in dieser Arbeit die allgemein übliche Konvention verwendet, dass die positive [111]-Richtung vom Kation zum Anion verläuft. Im konkreten Fall der teilweise ionischen Bindung entspricht dies dem Vektor vom Gallium- zum Arsen-Atom (vergleiche Abbildung 1 auf Seite 4). Damit sind die piezoelektrischen Konstanten für GaAs, AlAs, InAs als negativ festgelegt, während sie zum Beispiel für Aluminiumphosphid (AlP) und Indiumphosphid (InP) positiv sind.

Gleichung (40) zeigt, dass die resultierende Polarisierung proportional zur Verzerrung ist. Im Kristallsystem gilt, dass nur die Elemente von ε einen Einfluss haben, die neben der Hauptdiagonale liegen. Die Dichte der Polarisationsladungen ρ_{piezo} , die von der piezoelektrischen Polarisierung herrühren, kann wie folgt berechnet werden:

$$\rho_{\text{piezo}}(\vec{x}) = -\text{div} \vec{P}(\vec{x}) = -2e_{14} \left(\frac{\partial}{\partial \bar{x}} \varepsilon_{\bar{y}\bar{z}} + \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \varepsilon_{\bar{z}\bar{x}} + \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \varepsilon_{\bar{x}\bar{y}} \right). \quad (41)$$

Sollen Größen wie Polarisation und Verzerrungstensor in einem von den Kristallachsen abweichenden System bestimmt werden, sind zusätzliche Rotationen erforderlich. Im folgenden Kapitel wird das Simulationsprogramm vorgestellt, das diese Operationen intern durchführt und so die Berechnung von Verzerrungsprofilen, Bandverschiebungen und Polarisationsladungen in beliebigen Koordinatensystemen ermöglicht.

2.8 Zusammenfassung

Die Kristallstruktur eines Halbleiters bildet die Grundlage für die Bestimmung der Bandstruktur, die für das Material GaAs diskutiert wurde. Sowohl im Volumenmaterial, als auch besonders in niedrigdimensionalen Strukturen können sich Exzitonen bilden, deren Bindungsenergie mit abnehmender Dimension steigt. Im T-förmigen Kreuzungsbereich zweier unverspannter Typ-I-Quantenfilme entsteht rein quantenmechanisch ein eindimensionaler Quantendraht. In den Konturdiagrammen der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten der Löcher an der T-Kreuzung spiegelt sich unmittelbar die Richtungsabhängigkeit der effektiven Lochmassen wider.

Bei hohen Werten für die Einschlussenergie E_c lassen sich die Vorteile von Quantendrahtsystemen besonders gut nutzen. Neue Einschlusskonzepte zur Vergrößerung von E_c basieren auf Verspannungen, die durch Gitterfehlpassungen an Heterogrenzflächen entstehen, und den daraus resultierenden Bandkantenverschiebungen. Die Verzerrungen beeinflussen den Kristall in zweierlei Weise: Erstens ändert sich die energetische Lage von Leitungs- und Valenzbandkanten und es kann zu einer Aufspaltung der Energieniveaus kommen. Die Stärke von Aufspaltung und Verschiebung hängt von den entsprechenden Deformationspotentialen ab. Zweitens können über den piezoelektrischen Effekt feste Raumladungen generiert werden, für die im Fall von Zinkblendestrukturen die piezoelektrische Konstante e_{14} von Bedeutung ist.

3 Simulationen

Im Zentrum dieses Abschnitts steht die Präsentation eines neuen Strukturkonzepts, das hohe Einschlussenergien erwarten lässt. Anhand eines Beispiels werden die in derartigen Systemen auftretenden Verspannungen diskutiert. Anschließend erfolgt die Berechnung der resultierenden Bandkantenverläufe und Wellenfunktionen unter besonderer Berücksichtigung des piezoelektrischen Effekts. Zunächst jedoch wird das für die Simulationen verwendete Programm vorgestellt.

3.1 Programm `nextnano`³

Voraussetzung für die Berechnung quantisierter Zustände in einer verspannten Heterostruktur ist die Kenntnis des Auslenkungsfelds $\vec{u}(\vec{x})$. In Kapitel 2.5 wurde gezeigt, wie in einfachen Fällen der resultierende Verzerrungstensor ε direkt ermittelt werden kann. Im Allgemeinen muss die Gleichung

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0$$

für $i = 1, 2, 3$ und jeden Gitterpunkt gelöst werden (siehe Seite 24). Das bedeutet, dass man – wie bereits erwähnt – mit einem linearen Gleichungssystem der Dimension $3N \times 3N$ konfrontiert ist, wobei N die Anzahl der Gitterpunkte angibt.

Zur Lösung des Gleichungssystems wurde das Programm `nextnano`³ eingesetzt [Nex04]. Diese Software ermöglicht nicht nur die Bestimmung des Verzerrungsprofils innerhalb der Elastizitätstheorie, sondern auch die Berechnung von Leitungs- und Valenzbandenergien sowie der quantisierten Zustände. Darüber hinaus kann mit `nextnano`³ auch das Verhalten in Nichtgleichgewichtssituationen, beispielsweise bei angelegter äußerer Spannung, untersucht werden. Diese Arbeit hingegen behandelt ausschließlich Systeme im Gleichgewicht. So wurden alle gezeigten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten, Bandkantenverläufe und Elemente des Verzerrungstensors mit dem genannten Programm berechnet. Da Teile der Software erst entwickelt und getestet werden mussten, sind die vorgestellten Simulationsergebnisse das Resultat einer engen Kooperation mit Stefan Birner. Er nahm auch die notwendigen Modifikationen im Programmablauf von `nextnano`³ vor, dessen Grundzüge im Folgenden skizziert werden.

In einer Eingabedatei wird die Geometrie des untersuchten Systems spezifiziert und ein inhomogenes Gitter definiert, auf das die Probenstruktur abgebildet wird. Da bei ei-

ner Heterostruktur das System aus mehreren Bereichen besteht, ist jedem Gitterpunkt eine Materialnummer zugeordnet. Eine zweite Datei stellt für jedes Material die notwendigen Parameter zur Verfügung. In dieser Datensammlung sind die effektiven Massen bzw. Luttingerparameter ebenso tabelliert wie die Deformationspotentiale, piezoelektrische Konstanten oder auch die Energien der Leitungs- und Valenzbandkanten im unverspannten Kristall. Die Materialkonstanten ternärer Halbleiterverbindungen können mittels linearer oder quadratischer Interpolation bestimmt werden. Analog folgen die Parameter quaternärer Verbindungen aus der Interpolation zwischen zwei ausgewählten ternären Materialien.

Für die hier untersuchten Strukturen wurden die $[100]$ -, $[011]$ - und $[0\bar{1}1]$ -Richtungen als x -, y - und z -Achsen des Simulationssystems definiert. Die Ausdehnung des Simulationsgebiets beträgt 1010 nm in x - und 3700 nm in y -Richtung. Als Materialbereiche treten die beiden in $[100]$ - und $[011]$ -Richtung gewachsenen Filme sowie das umgebende Barrierenmaterial auf. Das inhomogene Gitter, auf dem die Gleichungen diskretisiert werden, besteht aus 94×173 Punkten, die in der Nähe der T-förmigen Kreuzung der Quantenfilme die größte Dichte haben. Da alle in dieser Arbeit betrachteten Probenstrukturen bezüglich der z -Richtung translationsinvariant sind, beruhen die durchgeführten Berechnungen auf zweidimensionalen Simulationen. Mit **nextnano**³ kann man aber ebenso ein- oder dreidimensionale Systeme behandeln.

Die Darstellung der Ergebnisse der zweidimensionalen Simulationen erfolgt stets für einen $60 \times 60 \text{ nm}^2$ großen Ausschnitt. Dieser Bereich, der in Abbildung 10 zu sehen ist, informiert immer über alle wesentlichen Resultate. Die Orientierung, die im Folgenden beibehalten wird, ist so gewählt, dass die $[100]$ -Richtung (x) nach rechts und die $[011]$ -Richtung (y) nach oben zeigt.

Im Programmablauf von **nextnano**³ wird zu Beginn das Auslenkungsfeld $\vec{u}(\vec{x})$ für alle Gitterpunkte unter Berücksichtigung der in der Eingabedatei spezifizierten Vorgaben (beispielsweise periodische Randbedingungen) berechnet. Dabei müssen an den Heteroübergängen ortsgleiche Punkte eingefügt werden. Das genaue Rechenverfahren mit Hilfe der Finite-Volumen-Methode ist in der Arbeit von Stefan Hackenbuchner dokumentiert [Hac02]. Hier wird auch die Bedeutung des Referenzmaterials erklärt, in dem definitionsgemäß keine Verspannungen auftreten. Wichtig ist, dass die in der Ausgabedatei stehenden Elemente des Verzerrungstensors an jedem Ort bezüglich des dort befindlichen, unverspannten Materials angegeben werden. Da an einer Grenzfläche die lateralen Gitterkonstanten übereinstimmen müssen, zeigen dann die entsprechenden Elemente des Verzerrungstensors Unstetigkeiten.

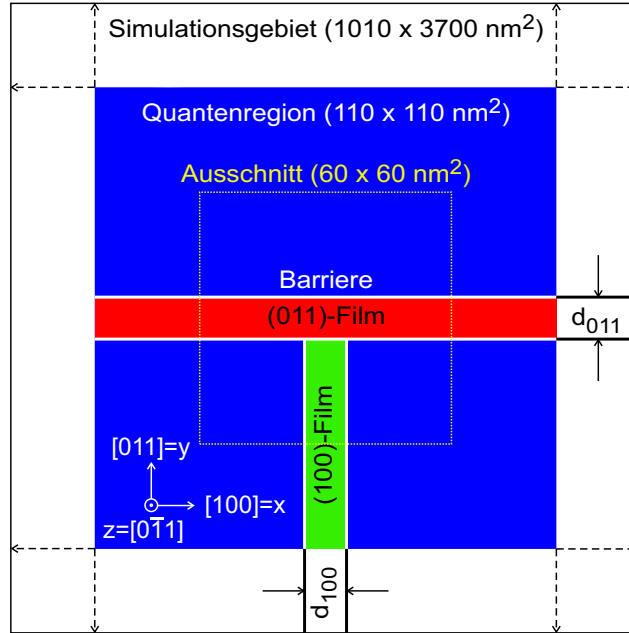


Abbildung 10: *Schema des Simulationsgebiets. Beginnend mit Abbildung 13 werden die Resultate der Berechnungen für den gezeigten $60 \times 60 \text{ nm}^2$ großen Ausschnitt der Quantenregion dargestellt.*

Da auch bei einer zweidimensionalen Simulation physikalisch ein dreidimensionaler Kristall vorliegt, können zur Berechnung des Auslenkungsfelds $\vec{u}(\vec{x})$ die entsprechenden Routinen des höherdimensionalen Falls verwendet werden, wenn die Bedingung $\frac{\partial \vec{u}}{\partial z} = 0$ implementiert ist, also keine Abhängigkeit des Auslenkungsvektors von der invarianten Richtung z vorliegt. Die Simulation kann aber durchaus ein von null verschiedenes $u_z(x, y)$ liefern. Das bedeutet anschaulich, dass allen Materialien in der invarianten Richtung die Gitterkonstante des Referenzmaterials aufgeprägt wird. Dass dies physikalisch korrekt ist, wird auf Seite 46 durch den Vergleich von zwei- und dreidimensionalen Simulationen bestätigt.

Nach der Berechnung aller Auslenkungsvektoren ermittelt nextnano³ in einem zweiten Programmblock die Bandkantenverläufe sowie die Energien und Wellenfunktionen der quantisierten Zustände. Hierzu ist es notwendig, in der Eingabedatei Quantenregionen zu spezifizieren. In diesen Bereichen, die unabhängig von den Materialregionen festgelegt werden können, werden die Dichten von Elektronen und Löchern unter Berücksichtigung der Randbedingungen quantenmechanisch berechnet. Nur hier sind die Wellenfunktionen definiert. Konkret beträgt die Größe der Quantenregion im vorliegenden Fall $110 \times 110 \text{ nm}^2$. In Abbildung 10 erkennt man, dass sie damit mehr als dreimal so groß ist wie der dort gezeigte Ausschnitt. Das gesamte Simulationsgebiet ist jedoch viel größer als die Quantenregion, um den Einfluss von Randeffekten gering zu halten.

In diesem zweiten Programmblock werden die Schrödingergleichung und die Poissongleichung (siehe unten) selbstkonsistent gelöst. Dies erfordert eine Erweiterung des Hamiltonoperators für den unverspannten Zustand, der in den Gleichungen (10) und (11) auf Seite 12 vorgestellt wurde. Das bedeutet, dass man für Leitungs- und Valenzband die zusätzlichen Verzerrungs-Hamiltonoperatoren H_ε^α und H^ε berücksichtigt, die bereits auf den Seiten 27 und 29 in den Gleichungen (36) und (37) angegeben wurden. Auf diese Weise gehen die aus den Verspannungen folgenden Bandenergieverschiebungen und -aufspaltungen in die Simulation ein.

Die von den Nichtdiagonalelementen des Verzerrungstensors (im Kristallsystem) induzierten piezoelektrischen Polarisationsladungen werden über die Poissongleichung berücksichtigt. Diese ergibt sich aus den Maxwellgleichungen und hat die Form:

$$-\operatorname{div} [\varepsilon_r(\vec{x}) \varepsilon_0 \operatorname{grad} \Phi(\vec{x})] = \rho(\vec{x}). \quad (42)$$

Dabei bezeichnet $\varepsilon_r(\vec{x})$ die dimensionslose relative Dielektrizitätskonstante, die materialabhängig und für Zinkblendestrukturen skalar ist. Die Dielektrizitätskonstante des Vakuums ε_0 hat den Wert $8,8542 \cdot 10^{-12} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$, $\Phi(\vec{x})$ ist das elektrische Potential (mit der Einheit [V]) und $\rho(\vec{x})$ die Ladungsdichte. Letztere wird in $[\text{C}/\text{m}^3]$ angegeben und setzt sich aus den Dichten n und p der Elektronen und Löcher sowie aus den piezoelektrischen Raumladungen ρ_{piezo} nach Gleichung (41) auf Seite 31 zusammen:

$$\rho = -n + p + \rho_{\text{piezo}}. \quad (43)$$

Da die Simulationen für eine Temperatur von 4 K durchgeführt werden, sind n und p aufgrund der Fermiverteilung zwar von null verschieden, jedoch gegenüber den piezoelektrischen Polarisationsladungen vernachlässigbar, weil im betrachteten Fall keine Dotierungen vorliegen. Aus dem gleichen Grund sind Beiträge, die von ionisierten Donatoren und Akzeptoren stammen, hier nicht von Interesse, obwohl sie im allgemeinen Simulationsschema von nextnano³ in die Dichte ρ eingehen.

Das elektrische Potential $\Phi(\vec{x})$ beeinflusst die energetischen Lagen von Leitungs- und Valenzband $E_c(\vec{x})$ und $E_v(\vec{x})$ über folgende Gleichungen:

$$\begin{aligned} E_c(\vec{x}) &= E_{c,n}(\vec{x}) - e\Phi(\vec{x}), \\ E_v(\vec{x}) &= E_{v,n}(\vec{x}) - e\Phi(\vec{x}), \end{aligned}$$

wobei e die Elementarladung mit dem Wert $1,6022 \cdot 10^{-19} \text{ C}$ ist. Bereits in Abschnitt 2.6 wurde gezeigt, wie – für einen bestimmten Punkt α im reziproken Raum – die neue Lage des Leitungsbands $E_{c,n}$ im verspannten Zustand aus $E_{c,0}$ ermittelt werden kann. Die Werte für die Bandkanten in den unverspannten Materialien $E_{c,0}$ und $E_{v,0}$ sind in der schon erwähnten Parameterdatei aufgeführt. Dabei wird angenommen, dass man diese Energien auf einer absoluten Skala angeben kann. Die Werte der Bandkanten

müssen demnach aufeinander abgestimmt werden, was im Rahmen einer Theorie nach van de Walle geschieht [Wal87].

Einerseits hängen nun die Wellenfunktionen als Lösungen der Schrödingergleichung über obige Gleichungen vom elektrischen Potential $\Phi(\vec{x})$ ab, da der Bandkantenverlauf beeinflusst wird. Andererseits gehen in die Berechnung des elektrischen Potentials mit Hilfe der Poissongleichung (42) die Dichten ein. Diese ergeben sich aus den zu den Wellenfunktionen gehörenden Zuständen durch Besetzung nach der entsprechenden Fermiverteilung. Deshalb müssen Schrödinger- und Poissongleichung im Prinzip selbstkonsistent gelöst werden. Die Berechnung übernimmt das Programm next**nano**³, wobei technische Details zur Diskretisierung der Schrödingergleichung auf dem inhomogenen Gitter und zur Lösung der Poissongleichung mit Hilfe der Finite-Volumen-Methode in Referenz [Hac02] zu finden sind. Im vorliegenden Fall, bei dem die festen piezoelektrischen Raumladungen die Ladungsdichte in Gleichung (43) dominieren, ist statt der Selbstkonsistenz das einmalige Lösen der Poissongleichung ausreichend.

Die Simulation der Verspannungen, Bandkantenverläufe und Wellenfunktionen wird an einem vorher spezifizierten Punkt α im reziproken Raum durchgeführt. Die aktuelle Version der Software erlaubt dabei Berechnungen für das Leitungsband am Γ -, X- und L-Punkt. Im Valenzband kann das schwere, leichte und abgespaltene Lochband am Γ -Punkt behandelt werden. Als Simulationsmodelle stehen in den Quantenregionen grundsätzlich die Einband-Schrödingergleichung, die Sechsband- und die Achtband- $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Methode zur Verfügung.

Für zweidimensionale Systeme waren zum Zeitpunkt der Durchführung dieser Arbeit jedoch noch keine $\vec{k} \cdot \vec{p}$ -Rechnungen mit next**nano**³ möglich. Somit beruhen sämtliche Ergebnisse auf Einband-Simulationen, die sich wegen der direkten Bandlücke von GaAs auf den Γ -Punkt beziehen. Da für die hier untersuchten Strukturen auch im Fall von Verspannungen stets der quantisierte Zustand im Schwerlochband der energetisch höchstliegende war, kommt den Resultaten, die für dieses Loch präsentiert und diskutiert werden, besondere Bedeutung zu.

Aufgrund des Entwicklungsstands von next**nano**³ war bei den zweidimensionalen Simulationen noch keine Berücksichtigung exzitonerischer Effekte möglich. Deren Einfluss wird später diskutiert. Alle in dieser Arbeit angegebenen Einschlussenergien ergeben sich aus der Differenz der Übergangsenergien von Quantendraht und Quantenfilm (vergleiche Kapitel 2.4). Dabei ist wichtig, dass die Übergangsenergie stets vereinfacht mit der Differenz von kleinster quantisierter Elektron- und größter quantisierter Lochenergie gleichgesetzt wurde.

3.2 Simulationsparameter

In Tabelle 1 sind die bei den Simulationen verwendeten Parameter zusammengestellt. Die aufgeführten Werte gelten bei einer Temperatur von 4 K und beziehen sich auf den Γ -Punkt. Alle Parameter wurden bereits auf den vorhergehenden Seiten eingeführt und werden an dieser Stelle kurz wiederholt.

	GaAs	AlAs	InAs
$E_{c,0}^{\Gamma}$ [eV]	2,979	4,008	2,103
$E_{v,0,cm}$ [eV]	1,346	0,816	1,556
Δ_0 [eV]	0,341	0,280	0,390
$\rightarrow E_{\text{gap}}$ [eV]	1,519	3,099	0,417
γ_1 [1]	6,98	3,76	20,0
γ_2 [1]	2,06	0,82	8,50
γ_3 [1]	2,93	1,42	9,20
$\rightarrow m_{hh}^{[100]}$ [m_0]	0,350	0,472	0,333
$\rightarrow m_{lh}^{[100]}$ [m_0]	0,090	0,185	0,027
$\rightarrow m_{hh}^{[011]}$ [m_0]	0,643	0,820	0,513
$\rightarrow m_{lh}^{[011]}$ [m_0]	0,081	0,159	0,026
$\rightarrow m_{hh,av}$ [m_0]	0,551	0,714	0,463
$\rightarrow m_{lh,av}$ [m_0]	0,082	0,163	0,026
m_e [m_0]	0,067	0,150	0,026
a [nm]	0,564 177	0,565 252	0,605 019
a_c^{Γ} [eV]	−7,17	−5,64	−5,08
a_v [eV]	+1,16	+2,47	+1,00
b [eV]	−2,00	−2,30	−1,80
d [eV]	−4,80	−3,40	−3,60
$C_{1111} = C_{11}$ [10^9N/m^2]	122,1	125,0	83,29
$C_{1122} = C_{12}$ [10^9N/m^2]	56,60	53,40	45,26
$C_{1212} = C_{44}$ [10^9N/m^2]	60,00	54,20	39,59
$e_{123} = e_{14}$ [C/m ²]	−0,16	−0,22	−0,045
ε_r [1]	12,93	10,06	15,15

Tabelle 1: Zahlenwerte der verwendeten Simulationsparameter (aus [Vur01, Nex04]).

Die Bandlücke E_{gap} (vergleiche Gleichung (1) auf Seite 6) folgt mit der Spin-Bahn-Aufspaltung Δ_0 aus den Lagen von Leitungsband $E_{c,0}^\Gamma$ und Valenzband $E_{v,0,cm}$. Aus den Luttingerparametern γ_1 , γ_2 und γ_3 ergeben sich die anisotropen effektiven Lochmassen $m_{hh}^{[100]}$, $m_{lh}^{[100]}$, $m_{hh}^{[011]}$ und $m_{lh}^{[011]}$ (siehe Gleichungen (15) bis (18) auf Seite 13). Diese werden ebenso wie die gemittelten Lochmassen $m_{hh,av}$ und $m_{lh,av}$ (vergleiche Gleichungen (19) und (20) auf Seite 14) sowie die effektive Elektronmasse m_e in Einheiten der Ruhemasse des Elektrons m_0 angegeben.

Für die Berechnung der Verspannungen sind neben der Gitterkonstante a und den Deformationspotentialen a_c^Γ , a_v , b und d auch die nichtverschwindenden Elemente des Elastizitätstensors C_{ijkl} von Bedeutung. Schließlich führt die Tabelle noch die piezoelektrische Konstante $e_{123} = e_{14}$ und die relative Dielektrizitätskonstante ε_r auf. Die hier benutzten Parameter entsprechen den in Referenz [Vur01] empfohlenen Werten. In dieser umfangreichen Datensammlung sind auch die jeweiligen Schwankungsbereiche tabelliert. Aus der dortigen Auflistung geht hervor, dass in der Literatur die Luttingerparameter und vor allem auch die Deformationspotentiale noch mit großen Unsicherheiten behaftet sind.

Bei den simulierten ternären Halbleitern $A_xB_{1-x}C$ wurden die Parameter $\Pi(A_xB_{1-x}C)$ grundsätzlich durch lineare Interpolation zwischen den zugehörigen binären Verbindungen AC und BC ermittelt. Ausnahmen von dieser Regel sind in Tabelle 2 zusammengefasst, welche die Zahlenwerte des jeweiligen Krümmungsparameters $K(\Pi)$ wiedergibt [Vur01]. Mit $K(\Pi)$ kann ein beliebiger Parameter Π einer ternären Verbindung $A_xB_{1-x}C$ wie folgt abgeleitet werden:

$$\Pi(A_xB_{1-x}C) = x \cdot \Pi(AC) + (1 - x) \cdot \Pi(BC) - K(\Pi) \cdot x \cdot (1 - x).$$

Nach diesem Schema ergeben sich auch die Parameter der quaternären Verbindung $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84-x}\text{Ga}_x\text{As}$ durch Interpolation zwischen den Datensätzen der ternären Halbleiter $\text{In}_{0,16}\text{Ga}_{0,84}\text{As}$ und $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$.

	AlGaAs	InGaAs	InAlAs
$K(E_{c,0}^\Gamma) [\text{eV}]$	0,331 5	0,477 0	0,700 0
$K(\Delta_0) [\text{eV}]$	0,00	0,15	0,15
$K(a_c^\Gamma) [\text{eV}]$	0,00	2,61	-1,40

Tabelle 2: Zahlenwerte der nichtverschwindenden Krümmungsparameter (aus [Vur01, Nex04]).

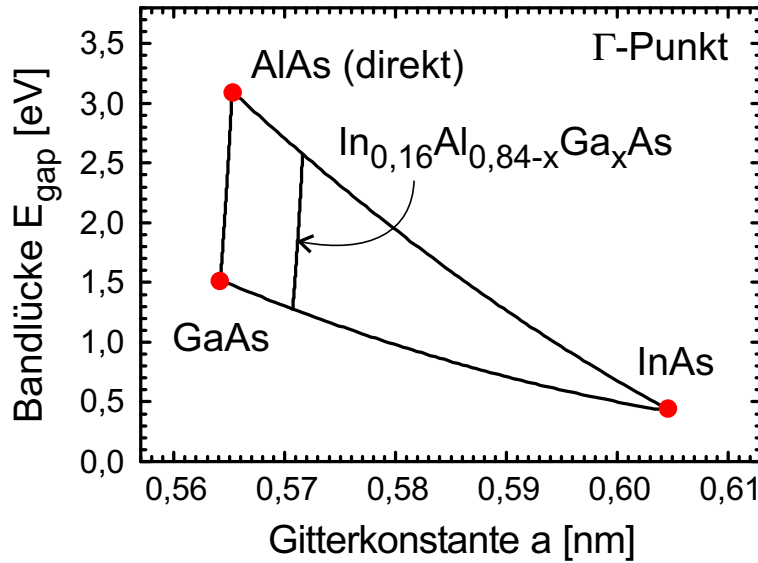


Abbildung 11: Bandlücken am Γ -Punkt in Abhängigkeit von der Gitterkonstante bei einer Temperatur von 4 K für Verbindungen im GaAs/AlAs/InAs-System. Auch für AlAs ist der Wert des direkten Übergangs eingetragen.

Abbildung 11 zeigt nun die aus den Daten der Tabelle 1 unter Berücksichtigung der Krümmungsparameter gewonnene Abhängigkeit der Bandlücke E_{gap} von der Gitterkonstante a für alle in dieser Arbeit wichtigen Halbleiterverbindungen. Deutlich ist zu erkennen, dass in GaAs/AlAs-Heterostrukturen aufgrund der ähnlichen Gitterkonstanten fast keine Verspannungen auftreten. Soll der Kristall bewusst Verzerrungen unterworfen werden, so kann dies durch den Einbau indiumhaltiger Schichten geschehen. Bei festem Indium-Anteil lässt sich die Größe der Bandlücke dann über den Aluminium-Gehalt einstellen.

3.3 Verspannungsinduzierte Quantendrähte

Den zentralen Punkt dieser Arbeit stellt die Realisierung eindimensionaler Quantendrähte dar, die sich durch eine hohe Einschlussenergie auszeichnen. Aufgrund der in Abschnitt 2.4 dargelegten fortgeschrittenen Optimierung herkömmlicher unverspannter und verspannter Strukturen ist eine neue Idee im Probenaufbau erforderlich, wenn noch größere Einschlussenergien erzielt werden sollen. So wird hier eine Struktur präsentiert, in der ein starker Ladungsträgereinschluss allein durch laterale Verzerrungsmodulationen innerhalb eines einzelnen Quantenfilms erreicht wird. Die Probenstruktur folgt dabei dem von Regelman *et al.* vorgeschlagenen Konzept [Reg99].

In herkömmlichen T-förmigen Strukturen bildet sich der Quantendraht durch die Ausdehnung der Wellenfunktion in die beiden angrenzenden Quantenfilme, wodurch die Grundzustandsenergie verringert wird (vergleiche Abschnitt 2.3). Hier ersetzt nun ein Material mit einer größeren Gitterkonstante den (100)-Quantenfilm. Wie Abbildung 12 zeigt, dient im vorliegenden Fall $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ als Verspannungsschicht.

Dieses Konzept unterscheidet sich damit von der Struktur, mit der Gershoni *et al.* die ersten Quantendrähte herstellten [Ger90], die auf dem Überwachsen von Spaltflächen basieren (siehe Kapitel 4.1). Als Verspannungsmaterial dienten dort $\text{In}_{0,063}\text{Ga}_{0,937}\text{As}$ -Lagen, die eine kleinere Bandlücke als GaAs besitzen. Um ein Abfließen der Ladungsträger oder Exzitonen in die verspannte Schicht zu verhindern, musste deshalb in [011]-Richtung (nach einer 2 nm dicken Pufferschicht) eine 20 nm breite $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barriere vor dem GaAs-Quantenfilm gewachsen werden. Dem Bericht über beobachtete Quantendrähte mit einer Einschlussenergie von 21 meV in diesen Strukturen wurden kritische Berechnungen entgegengestellt, die vorhersagten, dass die von der $\text{In}_{0,063}\text{Ga}_{0,937}\text{As}$ -Schicht herrührenden Verspannungen nicht bis zu dem 22 nm entfernten Quantenfilm reichen [Kas91].

Der Vorteil von $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ ist nun, dass es sowohl für Elektronen als auch für Löcher, die sich im überwachsenen Quantenfilm befinden, als Barriere wirkt. Deshalb kann der

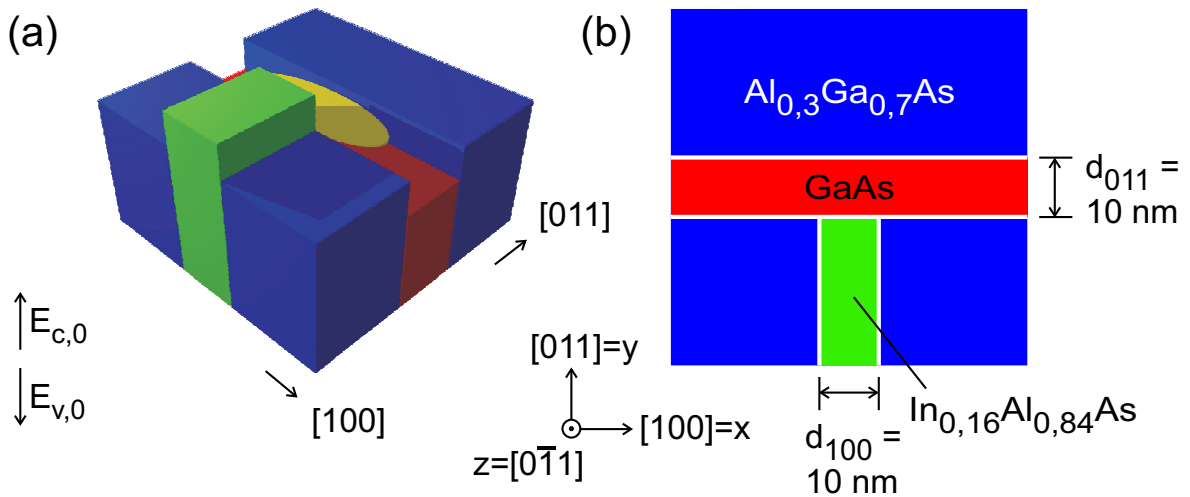


Abbildung 12: (a) Schematischer Bandkantenverlauf an der Kreuzung einer Verspannungsschicht mit einem überwachsenen Quantenfilm, wobei für das Valenzband die Energieachse nach unten zeigt. Die Wellenfunktion der Elektronen bzw. der Löcher ist gelb angedeutet. (b) Quantendrahtstruktur mit einer 10 nm breiten verspannten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage und einem ebenfalls 10 nm dicken GaAs-Quantenfilm.

(011)-Quantenfilm direkt auf die Spaltfläche gewachsen werden. Wichtig ist, dass sich auf diese Weise große Verspannungsmodulationen erzielen lassen. Wie die Simulationen zeigen werden, entstehen die Quantendrähte innerhalb des Quantenfilms genau an den Stellen, an denen das Material aufgrund der angrenzenden $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen einer tensilen Verzerrung unterworfen ist.

Die in Abbildung 12(a) skizzierte Auftragung der Bandkanten als Funktion des Orts zeigt noch einmal den wesentlichen Unterschied zu herkömmlichen Strukturen. Man kann erkennen, dass in der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage die Leitungsbandkante höher liegt als in der $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Region. Ebenso ist die Valenzbandkante im Bereich der verspannten Schicht energetisch am tiefsten. Demnach sorgen hier nicht die Barrieren der Heterostruktur für die eindimensionale Ladungsträgerlokalisierung. Vielmehr basiert – wie im Folgenden gezeigt wird – die Quantendrahtbildung einzig auf den induzierten Verspannungen. Aus der betrachteten Materialkonfiguration folgt weiterhin, dass bei der Ermittlung der Einschlussenergie nur mehr ein Quantenfilm zu berücksichtigen ist.

Den schematischen Aufbau der simulierten Struktur zeigt Abbildung 12(b). Eine 10 nm dicke $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Verspannungsschicht befindet sich in [100]-Richtung zwischen Bereichen aus $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$. In der dazu senkrechten [011]-Richtung liegt ein 10 nm breiter GaAs-Quantenfilm vor, der in das $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barrierenmaterial eingebettet ist. Um Randeffekte zu minimieren, ist der Quantenfilm in der Simulation in x -, also [100]-Richtung $1,01\text{ }\mu\text{m}$ lang, während sich die Verspannungsschicht in y -, also [011]-Richtung auf einer Länge von $3\text{ }\mu\text{m}$ erstreckt.

3.4 Verzerrungstensor

Für die vorgestellte Struktur sind auf den nächsten Seiten die berechneten Komponenten des Verzerrungstensors im Simulations- und im Kristallsystem in Abhängigkeit von der räumlichen Position dargestellt. Die zugrunde liegenden Auslenkungsvektoren und die resultierende hydrostatische Verzerrung werden ebenfalls präsentiert.

Simulationssystem

In Abbildung 13(a), die sich auf das Simulationssystem ($\{x, y, z\} = \{[100], [011], [0\bar{1}1]\}$) bezieht, erkennt man, dass die Komponente ε_{xx} im Bereich der Verspannungsschicht positive Werte annimmt. Dies ist verständlich, da $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ eine größere Gitter-

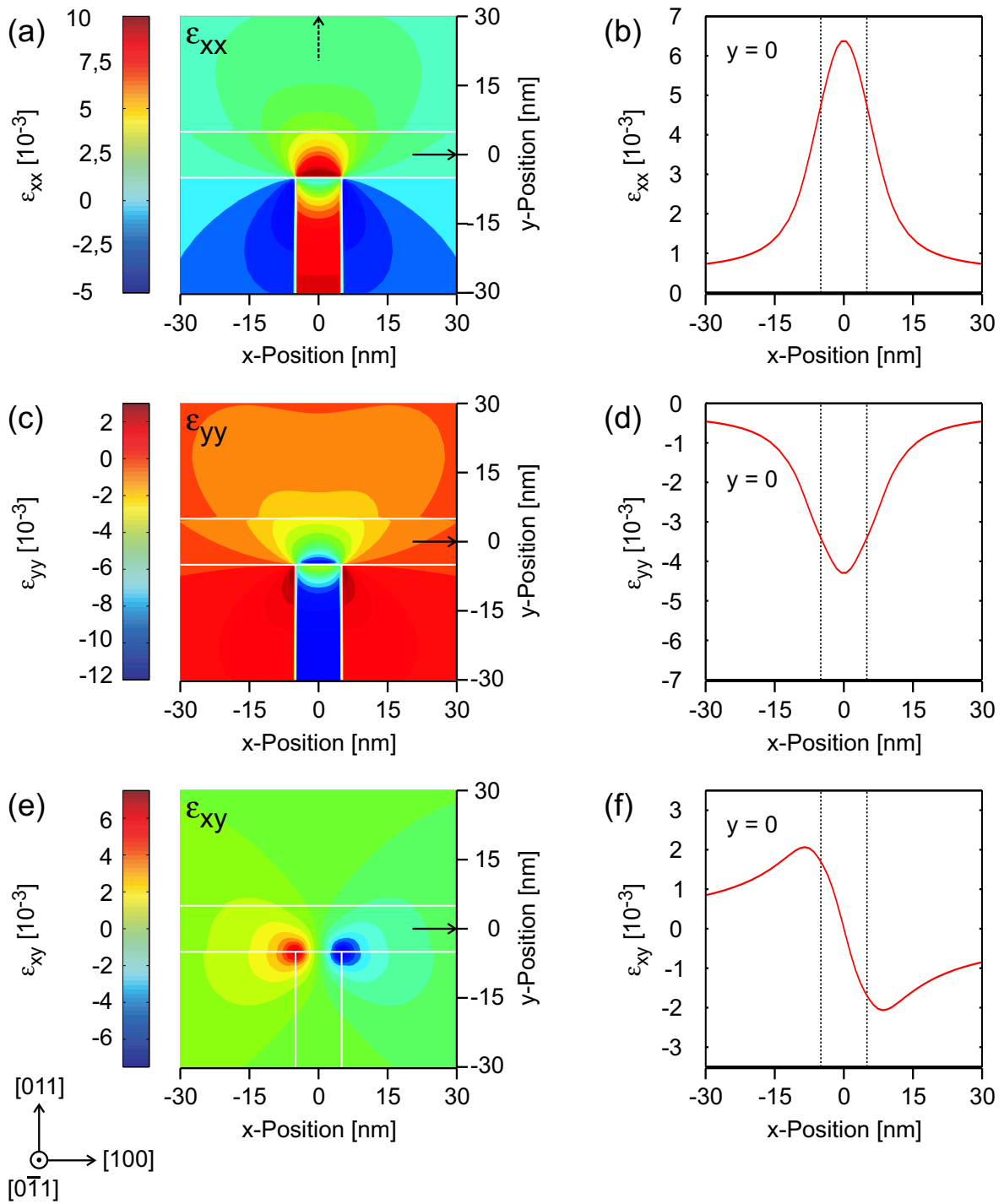


Abbildung 13: Links sieht man farbkodierte Darstellungen der berechneten xx -, yy - und xy -Komponenten des Verzerrungstensors im Simulationssystem für die Struktur aus Abbildung 12(b). In der rechten Spalte zeigen die horizontalen Schnitte an den mit Pfeilen markierten Stellen ($y=0$), dass die Verspannungsschicht die Auslenkungen im GaAs-Quantenfilm beeinflusst. Ein vertikaler Schnitt für die in (a) mit einem gestrichelten Pfeil gekennzeichnete Position wird in Abbildung 14 wiedergegeben.

konstante als $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ besitzt. Da sich die Gitterkonstante von $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ in der yz -Ebene an die des Barrierenmaterials $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ anpassen muss, wird die Elementarzelle der Verspannungsschicht aufgrund des Poissoneffekts in x -Richtung gedehnt. Wichtig ist, dass sich die tensile Verspannung in x -Richtung nun auf den (011)-Quantenfilm überträgt. Direkt an der Grenzfläche zur Verspannungsschicht wird die GaAs-Elementarzelle stark in x -Richtung gedehnt. In y -Richtung nimmt dieser Effekt mit zunehmender Entfernung von der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage ab. Die Abnahme erfolgt jedoch so langsam, dass der gesamte Quantenfilm am Ort der Verspannungsschicht einer tensilen Verspannung in x -Richtung unterworfen ist.

Für den in Abbildung 13(a) mit einem Pfeil markierten horizontalen Schnitt an der Position $y = 0$ gibt Teilbild (b) den Verlauf der xx -Komponente des Verzerrungstensors wieder. Hier wird noch einmal deutlich, dass große Dehnungen auf den Bereich um die 10 nm breite $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schicht beschränkt sind, die im Graphen durch gepunktete Linien markiert ist.

Wie sich ε_{xx} entlang der vertikalen Richtung ändert, kann Abbildung 14 entnommen werden. Die Darstellung zeigt einen Schnitt an der Position $x = 0$, welche in Abbildung 13(a) mit einem gestrichelten Pfeil markiert ist. Hier wird klar, dass auch der GaAs-Quantenfilm die Verspannungsschicht beeinflusst, da an der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}/\text{GaAs}$ -Grenzfläche die Gitterkonstanten der beiden Materialien in x - und in z -Richtung übereinstimmen müssen. Deswegen fällt ε_{xx} in der Verspannungsschicht bei Annäherung an

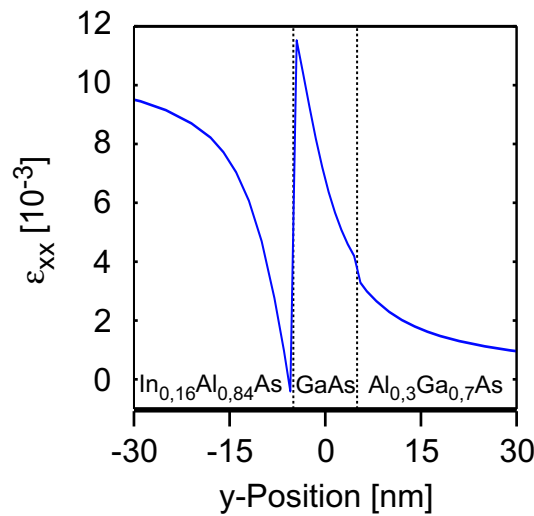


Abbildung 14: Verlauf der xx -Komponente des Verzerrungstensors im Simulationssystem in y -Richtung. Der Schnitt bezieht sich auf die Position $x=0$ und ist in Abbildung 13(a) mit einem gestrichelten Pfeil markiert.

den (011)-Quantenfilm auf etwa null. Die darauf folgende Unstetigkeit ergibt sich aus der Tatsache, dass stets die relativen Verzerrungen angegeben werden.

Aus der Abbildung geht auch hervor, dass in einer Entfernung von 22 nm die Dehnung nur noch einen Bruchteil des Maximalwerts beträgt. Dieser Abstand entspricht der Barrierenbreite der von Gershoni *et al.* präsentierten Struktur, die auf Seite 41 diskutiert wurde [Ger90]. Die kleine Unstetigkeit an der GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As-Grenzfläche rührt von dem minimalen Gitterkonstantenunterschied dieser Materialien her.

In Abbildung 13(c) ist die Tensorkomponente ε_{yy} farbkodiert dargestellt. Da sich die Gitterkonstante der Verspannungsschicht – wie bereits erwähnt – in [011]-Richtung der des Al_{0,3}Ga_{0,7}As anpassen muss, liegt hier eine kompressive Verspannung vor. Ebenso ist ε_{yy} im (011)-Quantenfilm negativ. Das bedeutet, dass die GaAs-Elementarzelle in der Nähe der In_{0,16}Al_{0,84}As-Lage in y -Richtung gestaucht wird. Dieses Verhalten kann man auch aus dem in Teilbild (d) dargestellten horizontalen Schnitt an der Position $y = 0$ ablesen. Der Effekt ist vom Betrag weniger stark als die in Teilbild (b) gezeigte Dehnung in x -Richtung. Trotzdem wird der Quantenfilm an der Position $x = 0$ erneut auf seiner vollen Breite beeinflusst, wie aus (c) hervorgeht.

Die nicht abgebildete zz -Komponente ist durch die Randbedingungen für zweidimensionale Simulationen festgelegt. So wird allen Bereichen in $[0\bar{1}1]$ -Richtung die Gitterkonstante des Referenzmaterials (Al_{0,3}Ga_{0,7}As) aufgeprägt (vergleiche nachfolgende Diskussion der dreidimensionalen Simulationen). Dies beeinflusst im Wesentlichen nur die Verspannungslage, da GaAs fast die gleiche Gitterkonstante wie Al_{0,3}Ga_{0,7}As aufweist.

Aufgrund der Probensymmetrie tritt neben den drei Diagonalelementen des Verzerrungstensors eine weitere, nichtverschwindende Komponente ε_{xy} im Simulationssystem auf. Deren örtliche Variation wird in Abbildung 13(e) dargestellt. In Teilbild (f) ist wieder der horizontale Schnitt an der Position $y = 0$ abgebildet.

Nach Gleichung (27) ist die relative Volumenänderung gleich der hydrostatischen Verzerrung $\varepsilon_{\text{hyd}} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$. Deren Werte sind farbkodiert in Abbildung 15(a) aufgetragen. Beim Betrachten des (011)-Quantenfilms erkennt man, dass dieser tensil verspannt ist. Den zugehörigen horizontalen Schnitt an der in (a) mit dem Pfeil markierten Stelle ($y = 0$) zeigt Teilbild (b). Deutlich ist auch hier eine lokal erhöhte Dehnungsverspannung im Bereich um die Verzerrungsschicht zu sehen.

Das wichtige Resultat einer tensilen hydrostatischen Verzerrung, die örtlich eingeschränkt ist, stellt die Grundlage für die Quantendrahtbildung dar. Entscheidend sind

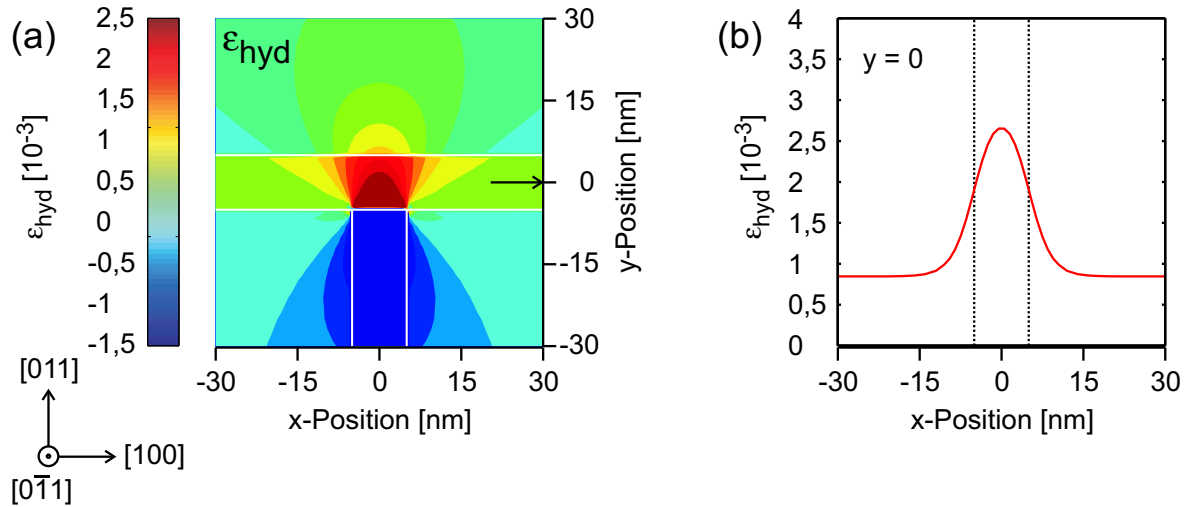


Abbildung 15: (a) Farbkodierte Darstellung der hydrostatischen Verzerrung für die Struktur aus Abbildung 12(b). Der Schnitt (b) an der Position des Pfeils ($y=0$) zeigt im Bereich um die $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage eine lokal erhöhte tensile Verspannung.

die lokalen Verschiebungen des Leitungsbands zu niedrigeren und des Valenzbands zu höheren Energien, die sich nach den Gleichungen (36) und (37) (siehe Seiten 27 und 29) mit den in Tabelle 1 (Seite 38) aufgelisteten Werten für die Deformationspotentiale ergeben. Mit den resultierenden Bandkantenverläufen können dann sowohl Elektronen als auch Löcher räumlich eingeschlossen werden. Das zugrunde liegende Einschlusspotential wird hier nicht durch die Barrieren der Heterostruktur, sondern allein verspannungsinduziert erzeugt.

Da in der vorliegenden Arbeit das Programm **nextnano**³ erstmals Verspannungen im Zweidimensionalen berechnete, wurden zur Kontrolle auch Simulationen für eine dreidimensionale Struktur durchgeführt. Der Querschnitt in der xy -Ebene entspricht weiterhin Abbildung 12(b). In der translationsinvarianten z -Richtung beträgt die Strukturdicke $4\,\mu\text{m}$. Um den Rechenaufwand zu begrenzen, wurden lediglich 21 äquidistante Gitterlinien im Abstand von je 200 nm definiert. Somit konnten die drei- und zweidimensionalen Simulationen an 21 Positionen in z -Richtung verglichen werden.

Im Zentrum der Struktur ergab sich wie erwartet eine Übereinstimmung aller Tensor-komponenten in der xy -Ebene mit der oben vorgestellten zweidimensionalen Rechnung. Sehr geringe Abweichungen am Rand der Struktur, also an den Positionen 1 und 21, resultieren aus der Tatsache, dass hier eine Relaxation in z -Richtung möglich ist. Da jedoch im Innern der Struktur die berechneten Werte des Verzerrungstensors mit denen aus den Abbildungen 13 bis 15 übereinstimmen, wird hier auf eine Wiederholung der

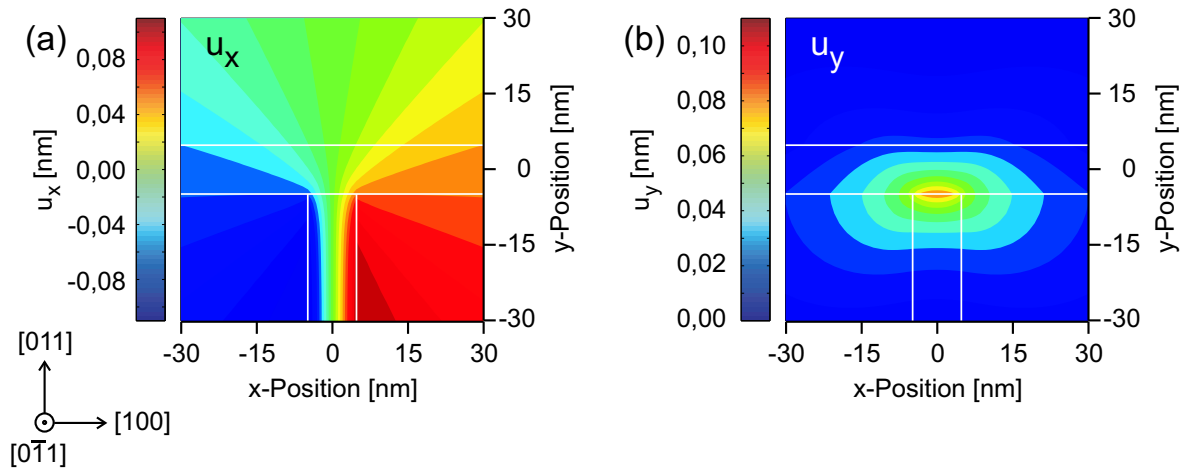


Abbildung 16: Komponenten des Auslenkungsvektors im Simulationssystem für die Struktur aus Abbildung 12(b). Bei allen Datenpunkten wurde ein fester Wert addiert, so dass auf den Achsen $x=0$ in (a) und $y=-30$ nm in (b) die Auslenkung null beträgt.

Graphen verzichtet. Insgesamt folgt, dass die in dieser Arbeit behandelten Strukturen durch zweidimensionale Simulationen korrekt beschrieben werden.

Vor der Diskussion der resultierenden Bandkantenverläufe und Wellenfunktionen wird kurz auf einige Aspekte der vorliegenden Verspannung eingegangen. Den Verzerrungen ε_{ij} liegen nach Gleichung (25) auf Seite 21 Auslenkungen der Materialpunkte aus ihrer Ruhelage zugrunde. Deren Werte u_x und u_y sind in Abbildung 16 dargestellt. In Teilbild (a) wurde für die Punkte auf der senkrechten Mittellinie ($x = 0$) die Auslenkung u_x null gesetzt und alle anderen Werte entsprechend angepasst, so dass man die Symmetrie bezüglich dieser vertikalen Achse klar erkennen kann. Der starke positive Gradient von u_x in x -Richtung innerhalb der Verspannungsschicht ist gleichbedeutend mit den großen Werten von ε_{xx} in diesem Bereich.

In Teilbild (b) wurde für die Punkte mit $y = -30$ nm die Auslenkung u_y null gesetzt. Kombiniert man die Änderung von u_y entlang der horizontalen Achse mit der Variation von u_x entlang der Vertikalen, ergibt sich die Komponente ε_{xy} des Verzerrungstensors.

Kristallsystem

Bisher bezogen sich die in den Abbildungen dargestellten Größen stets auf das Simulationssystem $x = [100]$, $y = [011]$ und $z = [0\bar{1}1]$. Durch eine Rotation um 45° bezüglich der $[100]$ -Achse gelangt man in das Kristallsystem $\tilde{x} = [100]$, $\tilde{y} = [010]$ und $\tilde{z} = [001]$.

Nach Gleichung (26) auf Seite 21 ändert diese Transformation nicht die Spur des Verzerrungstensors, kann jedoch Auswirkungen auf die einzelnen Tensorkomponenten haben.

Abbildung 17 stellt die Elemente des Verzerrungstensors im Kristallsystem $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ als Funktion der Position (x, y) im Simulationssystem dar. Aufgrund der Rotationsachse gilt $\varepsilon_{\tilde{x}\tilde{x}} = \varepsilon_{xx}$, wie auch aus Teilbild (a) hervorgeht. Hingegen ist

$$\varepsilon_{\tilde{y}\tilde{y}} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad \text{und} \quad \varepsilon_{\tilde{x}\tilde{y}} = \varepsilon_{\tilde{x}\tilde{z}} = \frac{\sqrt{2}}{2} \varepsilon_{xy},$$

was aus den Teilbildern (b) und (c) folgt. In diesem Achsensystem tritt mit $\varepsilon_{\tilde{y}\tilde{z}}$ ein weiteres von null verschiedenes Nichtdiagonalelement des Verzerrungstensors auf, das in Teilbild (d) dargestellt ist. Die Nichtdiagonalelemente im Kristallsystem sind von Bedeutung, da sie nach den Gleichungen (40) und (41) auf Seite 31 mit einer piezoelektrischen Polarisierung und festen Raumladungen verknüpft sind, deren Einfluss für die vorliegende Struktur im Folgenden noch genauer untersucht wird.

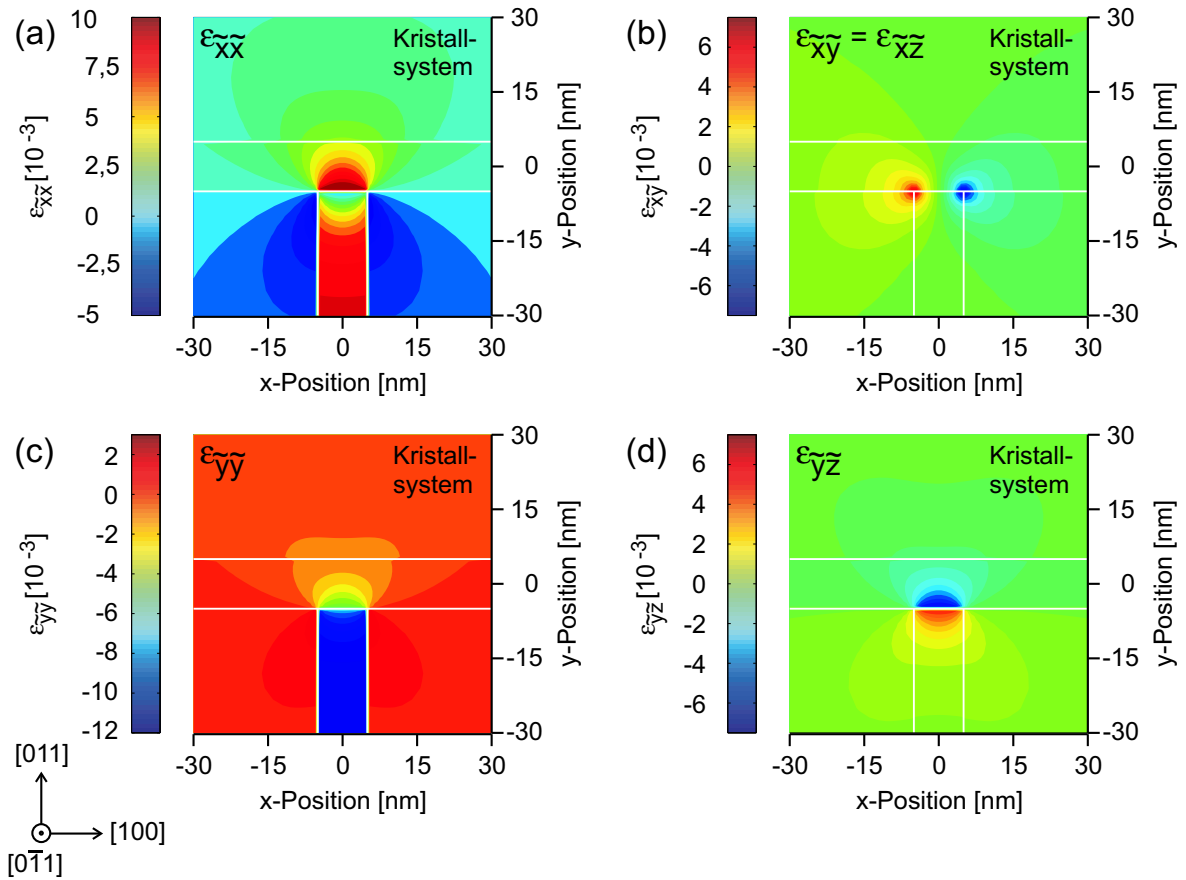


Abbildung 17: Berechnete $\tilde{x}\tilde{x}$ -, $\tilde{x}\tilde{y}$ -, $\tilde{x}\tilde{z}$ -, $\tilde{y}\tilde{y}$ - und $\tilde{y}\tilde{z}$ -Komponenten des Verzerrungstensors im Kristallsystem für die Struktur aus Abbildung 12(b).

3.5 Bandstruktur und Wellenfunktionen

Wenn der Verzerrungstensor ε für alle Positionen bekannt ist, lassen sich die Bandkantenverläufe und Aufenthaltswahrscheinlichkeiten durch Lösen von Poisson- und Schrödingergleichung ermitteln. Die Resultate dieser Rechnungen werden im folgenden Abschnitt dargestellt und diskutiert.

So zeigt Abbildung 18 die Lage von Leitungs-, Schwerloch- und Leichtlochband am Γ -Punkt, wobei das Maximum des Valenzbands im unverspannten Fall den Nullpunkt der Energieskala definiert. In der Näherung der Einband-Simulationen werden die Bänder als unabhängig voneinander betrachtet. Wie beim Bandlückenschema in Abbildung 12(a) ist klar zu erkennen, dass die Verspannungsschicht sowohl für die Elektronen als auch für die Löcher eine Barriere darstellt. Während die Teilbilder auf der linken Seite die Bandkantenverläufe farbkodiert zeigen, sind in der rechten Spalte horizontale Schnitte bei $y = 0$ entlang der durch die Pfeile vorgegebenen Richtungen abgebildet.

Das Leitungsbandminimum in Teilbild (a) nimmt wegen der Verspannungen innerhalb des (011)-Quantenfilms verschiedene Werte an. Aufgrund der tensilen hydrostatischen Verzerrung ist eine Energieabsenkung des Leitungsbandminimums gegenüber dem unverspannten Fall zu erwarten. Dieses lokale Minimum sorgt für den Quantendrahteinschluss. Wie der in Teilbild (b) dargestellte Schnitt zeigt, befindet sich der Punkt niedrigster Energie nicht zentral über der Verspannungsschicht, sondern etwa 5 nm nach rechts versetzt. Diese unmittelbare Konsequenz der durch die Verspannung generierten piezoelektrischen Polarisationsladungen wird später noch genauer untersucht.

In den Valenzbändern sind analog zu oben lokale Maxima zu erwarten und zu beobachten. Wieder liegen die Extremwerte nicht zentral, sondern nach links versetzt. Erneut sind dafür die festen Raumladungen des Piezoeffekts verantwortlich. Auf diese Weise trennt der Piezoeffekt das Leitungsbandminimum örtlich vom Valenzbandmaximum. In dieser Hinsicht unterscheidet sich die untersuchte Struktur von den in Abschnitt 2.3 diskutierten unverspannten T-förmigen Kreuzungen. Ob die Versetzung des Leitungsbandminimums nach rechts oder links erfolgt, hängt von den Kristallachsen ab. Würde die Vertikale nicht der $[011]$ - sondern der $[0\bar{1}1]$ -Richtung entsprechen, hätte dies eine gegenläufige Versetzung der Extrema zur Folge (siehe Vorzeichendiskussion auf Seite 31). Dabei ist die Kristallstruktur dafür verantwortlich, dass die genannten Richtungen bezüglich des ersten Wachstumsschritts nicht äquivalent sind, sondern zu spiegelverkehrten Resultaten führen. Der Unterschied lässt sich verstehen, wenn man die in $[011]$ - und $[0\bar{1}1]$ -Richtung verlaufenden Gallium-Arsen-Bindungsketten auf die (100)-Ebene projiziert. Dies wird in Kapitel 8.1 anhand von Abbildung 88 genauer erläutert.

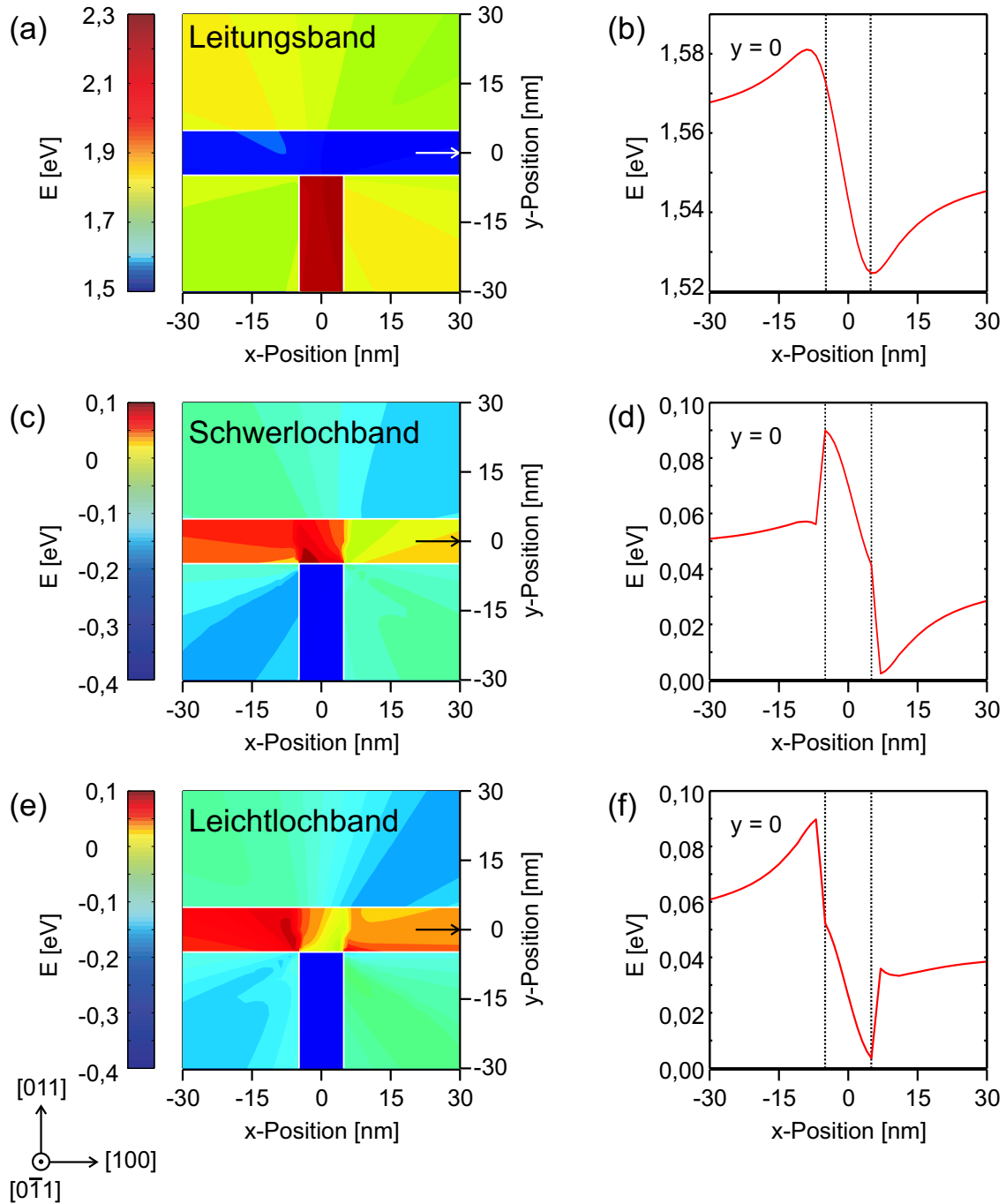


Abbildung 18: In der linken Spalte sind die ortsabhängigen Bandkanten des Leitungs-, Schwerloch- und Leichtlochbands an der verspannten Kreuzung in der Struktur aus Abbildung 12(b) dargestellt. Die horizontalen Schnitte auf der rechten Seite beziehen sich auf die Position $y=0$, die mit einem Pfeil markiert ist.

Aufgrund des Bandkantenverlaufs sind auch die Elektron- und Lochwellenfunktionen örtlich voneinander getrennt. In Abbildung 19 kann man die Aufenthaltswahrscheinlichkeit (Betragsquadrat der einhüllenden Wellenfunktion) für Elektron, Schwer- und

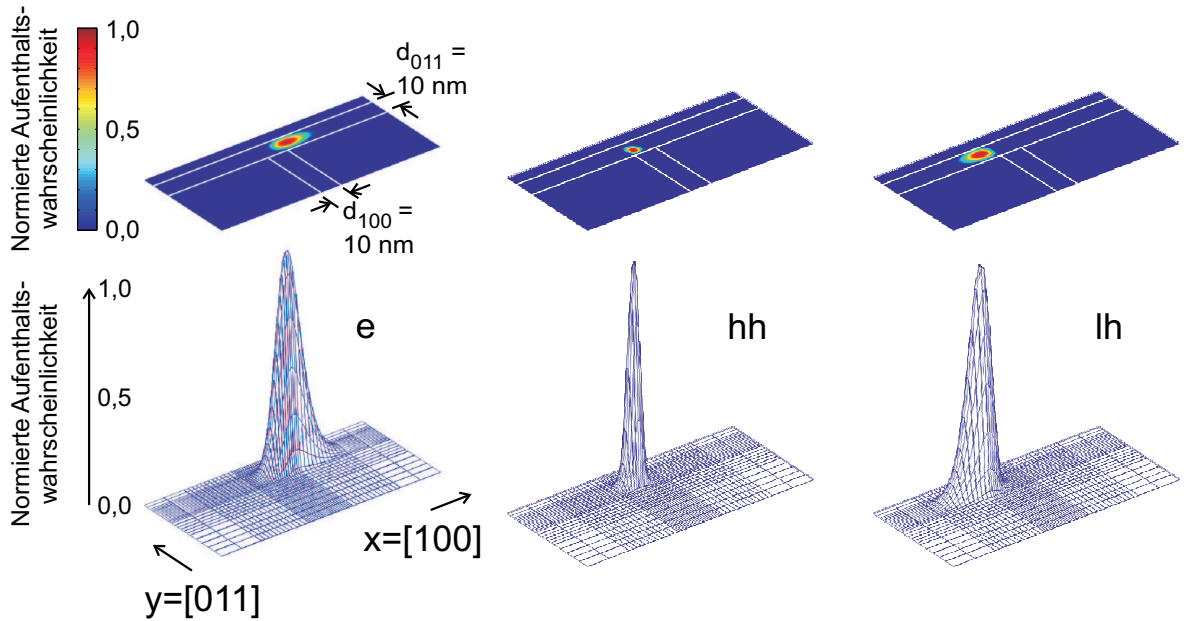


Abbildung 19: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektron (e), Schwerloch (hh) und Leichtloch (lh) an der verspannten Kreuzung in der Struktur aus Abbildung 12(b).

Leichtloch sehen, wobei die Maximalwerte auf eins normiert wurden. Anders als bei den unverspannten Quantendrähten sind die Ladungsträger hier ausschließlich auf den (011)-Quantenfilm eingeschränkt. Das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Leichtlochs hat einen größeren Abstand vom Zentrum als das des Schwerlochs.

Wie Abbildung 20 zeigt, ist die Schwerlochwellenfunktion auf einen kleineren Bereich lokalisiert als Leichtloch- und Elektronwellenfunktionen. Die Tatsache, dass sich Elek-

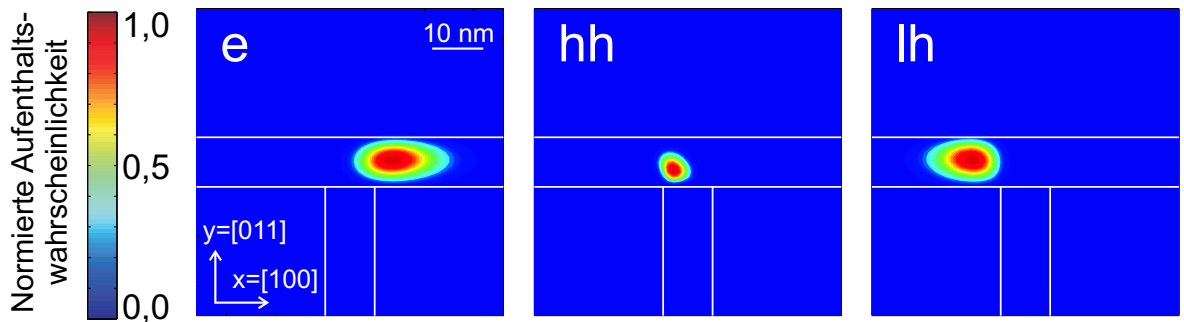


Abbildung 20: Konturdiagramm der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektron (e), Schwerloch (hh) und Leichtloch (lh) an der verspannten Kreuzung in der Struktur aus Abbildung 12(b).

tronen und Löcher an unterschiedlichen Positionen befinden, wirkt sich ungünstig auf die Lumineszenzausbeute aus, die vom räumlichen Überlapp der Wellenfunktionen abhängt. In Kapitel 8.2 wird jedoch ein Konzept vorgeschlagen, mit dem in Zukunft dieser Nachteil gegenüber unverspannten T-förmigen Quantendrahtstrukturen wettgemacht werden könnte.

3.6 Piezoeffekt

Mit dem Simulationsprogramm **nextnano**³ können auch fiktive Strukturen berechnet werden. Dieser Abschnitt klärt, was passiert, wenn man die Einflüsse der Verspannung – bei unveränderter Struktur – nicht oder nur teilweise berücksichtigt.

In Abbildung 21(a) ist zu sehen, dass es zu keiner Quantendrahtbildung kommt, wenn die Verzerrungs-Hamiltonoperatoren aus den Gleichungen (36) und (37) auf den Seiten 27 und 29 nicht mit einbezogen werden. Die dargestellten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten resultieren allein aus den Randbedingungen der Quantenregion. Mit dieser Simulation wurde nachgewiesen, dass die Quantendrähte rein durch Verspannung entstehen.

Berücksichtigt man den direkten Einfluss der Verzerrungen auf die Bandstruktur, lässt aber den Piezoeffekt außer Acht, indem die Piezokonstante e_{14} null gesetzt wird, folgt daraus die Aufhebung der örtlichen Trennung von Elektron- und Lochwellenfunktion. Dieses Verhalten ist in Abbildung 21(b) zu sehen. Demnach sorgt tatsächlich der Piezoeffekt für den verringerten Überlapp der Wellenfunktionen.

Zum Vergleich wird in Abbildung 21(c) die vollständige Simulation wiederholt, bei der sich Wellenfunktionen ergeben, die leicht nach rechts und links versetzt sind. Man kann erkennen, dass es zu einer Lokalisierung in der Nähe der Verspannungsschicht kommt, obwohl sich hier die höchste Barriere befindet. Damit unterscheiden sich diese Systeme wesentlich von T-förmigen Strukturen, bei denen die Quantendrähte dort entstehen, wo in [100]-Richtung keine Barriere, sondern ein Potentialtopf vorliegt.

Zur Lösung der Schrödingergleichung gehören neben den Wellenfunktionen auch die korrespondierenden Eigenenergien. In einer Näherung kann die Übergangsenergie für die Photolumineszenz mit der Differenz der Eigenenergien von Elektron und Schwerloch gleichgesetzt werden. Wird dies sowohl für den zweidimensionalen Quantenfilm als auch für den eindimensionalen Quantendraht durchgeführt, erhält man die Einschlussenergie als Differenz der beiden Übergangsenergien (vergleiche Kapitel 2.4 und 3.1).

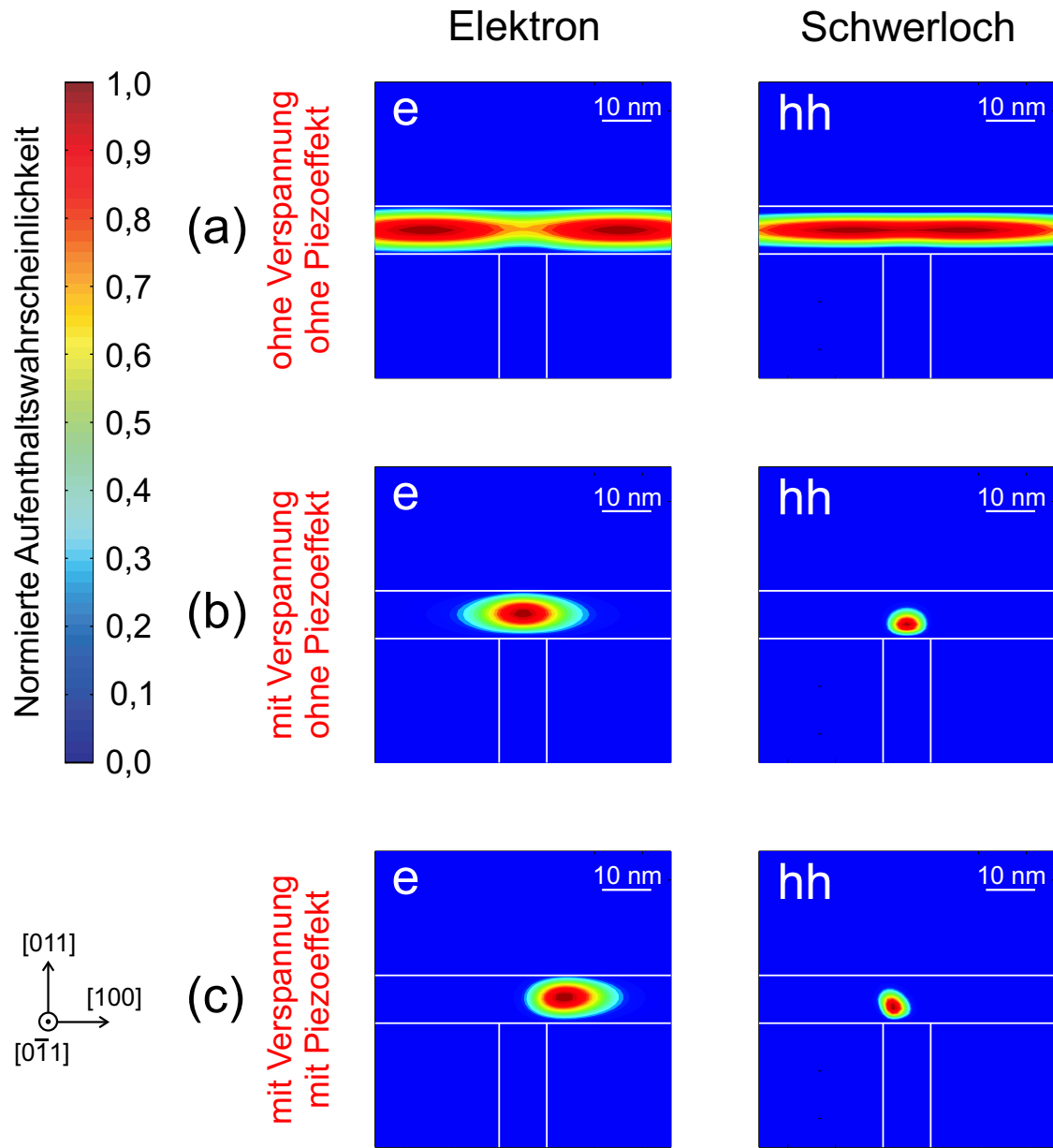


Abbildung 21: Berechnete Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektron (e) und Schwerloch (hh) an der verspannten Kreuzung in der Struktur aus Abbildung 12(b). Die in (a) gezeigten Simulationen vernachlässigen alle Verzerrungen, während in (b) nur die direkten Einflüsse der Verspannungen auf die Bandstruktur berücksichtigt werden. Die Resultate der vollständigen Berechnung mit Piezoeffekt sind in (c) abgebildet.

Bei Vernachlässigung der piezoelektrischen Polarisierung beträgt die Einschlussenergie $E_c = 26,2 \text{ meV}$, während die Simulation unter Berücksichtigung des Piezoeffekts $48,6 \text{ meV}$ liefert. Daraus geht hervor, dass der Piezoeffekt in der vorliegenden Struktur auch eine positive Auswirkung hat, da er für eine zusätzliche Erhöhung der Einschlussenergie sorgt.

Im Rahmen der Achtband- $\vec{k}\cdot\vec{p}$ -Methode wurden von Grundmann *et al.* Berechnungen der Einschlussenergie in derartigen Strukturen durchgeführt und die Ergebnisse für einige wenige Parameterkombinationen präsentiert [Gru00]. Anders als in dieser Arbeit konnten dabei keine piezoelektrischen Polarisierungen berücksichtigt werden. Deshalb liegen die dort vorgestellten Wellenfunktionen stets zentral zur Verspannungsschicht. Für eine Struktur, bei der eine 10 nm dicke $\text{In}_{0,2}\text{Al}_{0,8}\text{As}$ -Lage einen 10 nm breiten GaAs-Quantenfilm verspannt, der von $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barrieren umgeben wird, ist in Referenz [Gru00] eine Einschlussenergie von 62,5 meV angegeben.

Eigene Vergleichssimulationen an derselben Struktur lieferten einen Wert von 37,3 meV, der sich jedoch bei Berücksichtigung des Piezoeffekts auf 64,2 meV erhöhte. Dieser und alle weiteren Vergleiche ergaben, dass die Einband-Rechnungen mit **nextnano**³ deutlich kleinere Einschlussenergien liefern als die von Grundmann verwendete Achtband- $\vec{k}\cdot\vec{p}$ -Methode. Die experimentellen Resultate in Kapitel 7 werden zeigen, dass alle gemessenen Werte kleiner sind als die mit den Simulationen prognostizierten. Die überraschende Tatsache, dass die Einband-Rechnungen näher am Experiment liegen, kann eingehender untersucht werden, sobald mit **nextnano**³ auch zweidimensionale $\vec{k}\cdot\vec{p}$ -Rechnungen möglich sind.

3.7 Variation der Strukturparameter

Alle bisher präsentierten Simulationsergebnisse dienten dazu, das rein verspannungsinduzierte Entstehen von Quantendrähten zu erklären. Im Folgenden werden die Berechnungen von **nextnano**³ dazu benutzt, die Abhängigkeiten der Einschlussenergie E_c von den verschiedenen Strukturparametern zu bestimmen (siehe auch [Sch04a]).

Als Ausgangspunkte dienen dabei zwei Strukturen: Die erste ist die bisher untersuchte symmetrische Kreuzung einer 10 nm breiten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Verspannungsschicht mit einer ebenso dicken (011)-Lage aus GaAs. Bei der zweiten beträgt die Breite des (011)-Quantenfilms 7 nm, so dass eine in Bezug auf die Schichtdicken asymmetrische Kreuzung vorliegt. Das Barrierenmaterial ist in beiden Fällen $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$. Im Folgenden wird nun jeweils ein Parameter variiert.

In einer Simulationsreihe wurde untersucht, wie E_c sich ändert, wenn man statt GaAs ternäres $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ als Material für den (011)-Quantenfilm verwendet. Da mit steigendem Indium-Anteil x die Gitterkonstante größer wird, vermindert sich die tensile Verspannung. Die Erwartung einer kleiner werdenden Einschlussenergie wird durch Ab-

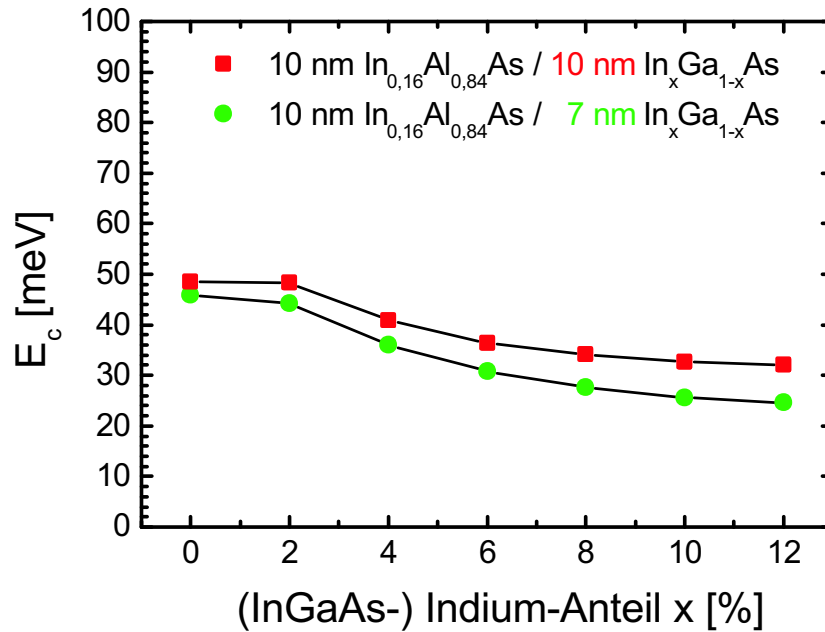


Abbildung 22: Abhängigkeit der berechneten Einschlussenergie E_c vom Indium-Gehalt x der überwachsenen $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ -Lage. Die Linien dienen der Orientierung.

bildung 22 bestätigt. Hier und in den folgenden Graphen geben Kurzschreibweisen wie „10 nm $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ / 10 nm $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ “ die Breiten und Materialien der Verspannungslage und der überwachsenen Schicht wieder. Für die Breite $d_{011} = 10$ nm des Quantenfilms nimmt E_c von 48,6 auf 32,1 meV ab, wenn x von 0 auf 12 % erhöht wird. Ist $d_{011} = 7$ nm, ändert sich E_c von 45,9 auf 24,6 meV.

Abbildung 23 gibt die Einschlussenergien für verschiedene Indium-Anteile x in der verspannenden $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ -Lage an. Da hier mit zunehmendem x aufgrund der größeren Gitterkonstante die tensile Verspannung im System erhöht wird, nimmt auch E_c zu. Die Einschlussenergie steigt dabei nahezu linear auf Werte von 76,3 meV ($d_{011} = 7$ nm) und 79,3 meV ($d_{011} = 10$ nm) bei einem Indium-Anteil von 24 %.

Grundsätzlich vernachlässigen die Simulationen eine mögliche Diffusion der Indium-Atome von der Verspannungsschicht in den überwachsenen Quantenfilm und gehen von einer vollständig elastischen Relaxation der eingebauten Verspannungen aus. Die Erhöhung des Indium-Anteils verringert jedoch die Filmdicke, die ohne Einbau von Versetzungen gewachsen werden kann. Ausgehend von dem Modell nach Matthews kann man die kritische Schichtdicke D berechnen, oberhalb derer Verspannungen durch den Einbau von Kristalldefekten abgebaut werden [Mat70]. Durch Lösen der in Referenz [Bha93] angegebenen impliziten Gleichung folgt der in Abbildung 23 zu sehende Verlauf, der sich ebenfalls durch eine Theorie nach van der Merwe gewinnen

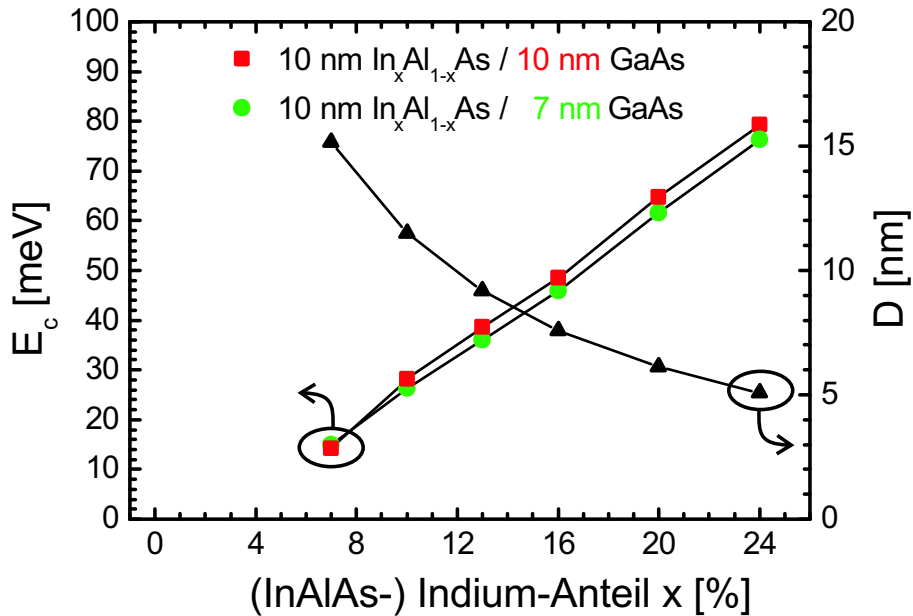


Abbildung 23: Abhängigkeit der berechneten Einschlussenergie E_c und der kritischen Schichtdicke D vom Indium-Gehalt x der verspannten $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ -Lage. Die Linien dienen der Orientierung.

lässt [Mer63a, Mer63b]. Bei einem Indium-Gehalt von 16 % beträgt die kritische Dicke nur 7,6 nm.

Da die in Abschnitt 7 diskutierten Proben 8, 10, 12 und 15 nm breite $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen besitzen, muss hier mit dem Vorliegen von Versetzungen gerechnet werden. Die experimentellen Resultate zeigen jedoch, dass die erwarteten Verspannungen an fast allen untersuchten T-Kreuzungen vorliegen und somit die eingebauten Versetzungen das Verzerrungsprofil nicht prinzipiell zerstören. Unterstützt wird dies durch eine von Jensen *et al.* realisierte Probe, bei der 17,9 nm $\text{In}_{0,10}\text{Al}_{0,18}\text{Ga}_{0,72}\text{As}$ auf eine $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Schicht gewachsen wurde [Jen01]. Auch für Indiumgalliumarsenidphosphid (InGaAsP) übertrifft die experimentelle kritische Schichtdicke den berechneten Wert [Oga98]. Dennoch lässt sich die Tatsache, dass in Kapitel 7.3 die Photolumineszenz einzelner Quantendrähte bei dicken Verspannungslagen nicht beobachtbar ist, mit dem deutlichen Überschreiten der kritischen Schichtdicke erklären.

Bereits aus den Abbildungen 22 und 23 geht hervor, dass die Breite d_{011} des GaAs-Quantenfilms nur einen geringen Einfluss auf die Einschlussenergie hat. Abbildung 24 quantifiziert diesen Sachverhalt noch einmal. Wird d_{011} in der Simulation von 4 auf 19 nm erhöht, durchläuft E_c den Wertebereich von 42,3 bis 50,6 meV. Anschaulich lässt sich das durch die Tatsache erklären, dass die größte tensile Verspannung in der GaAs-

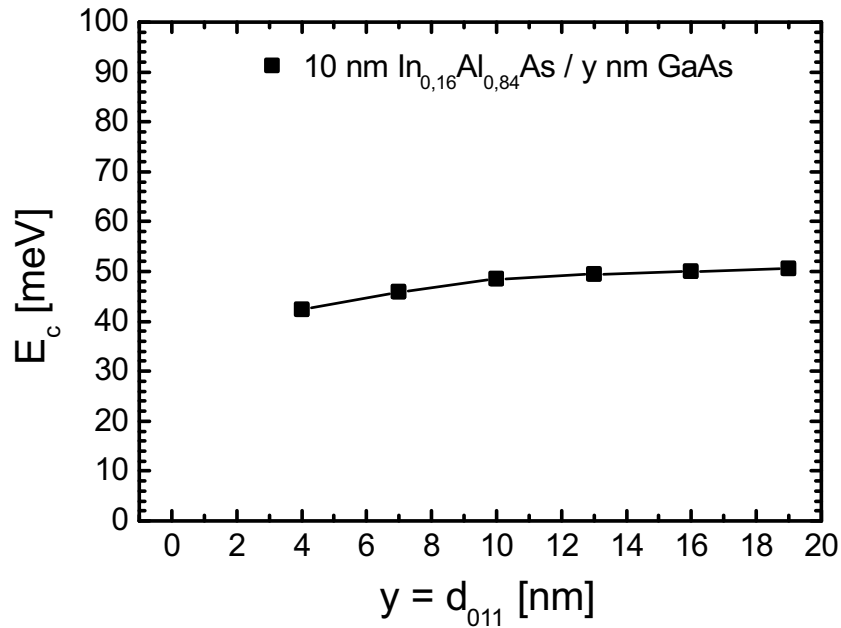


Abbildung 24: Abhängigkeit der berechneten Einschlussenergie E_c von der Dicke d_{011} der überwachsenen GaAs-Lage. Die Linien dienen der Orientierung.

Schicht direkt an der Grenzfläche zur $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage herrscht. Eine Verbreiterung des (011)-Quantenfilms verringert zwar dessen Übergangsenergie und die des Quantendrahts, ändert aber kaum die relative Energieabsenkung, da diese hauptsächlich vom Maximum der hydrostatischen Verzerrung direkt an der Grenzfläche zur Verspannungsschicht bestimmt wird.

Schließlich zeigt Abbildung 25 die Abhängigkeit der Einschlussenergie von der Breite d_{100} der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schicht. Aus dem Graphen geht noch einmal klar hervor, dass der piezoelektrische Effekt für eine deutliche Erhöhung von E_c sorgt. Alle mit der Kennzeichnung „ohne Piezoeffekt“ versehenen Datenpunkte stammen von Simulationen, bei denen die Piezokonstante e_{14} null gesetzt, jedoch der direkte Einfluss der Verzerrungen auf die Bandstruktur berücksichtigt wurde. Die so ermittelten Einschlussenergien werden bei der Diskussion der experimentellen Resultate in Abschnitt 7 benötigt.

Mit zunehmendem d_{100} steigt die tensile Verspannung in der Struktur. Damit erhöht sich auch die Einschlussenergie E_c systematisch. Die Simulationen, die auch die piezoelektrischen Polarisationsladungen berücksichtigen („mit Piezoeffekt“), führen unter anderem zu folgenden Einschlussenergien: Beträgt die Breite der Verspannungsschicht 16 nm, ergeben sich für E_c Werte von 73,1 meV ($d_{011} = 7$ nm) und 79,7 meV ($d_{011} = 10$ nm), die deutlich über dem bisherigen Rekord von 54 meV liegen, der an einer unverspannten T-Kreuzung gemessen wurde (vergleiche Kapitel 2.4). Als wich-

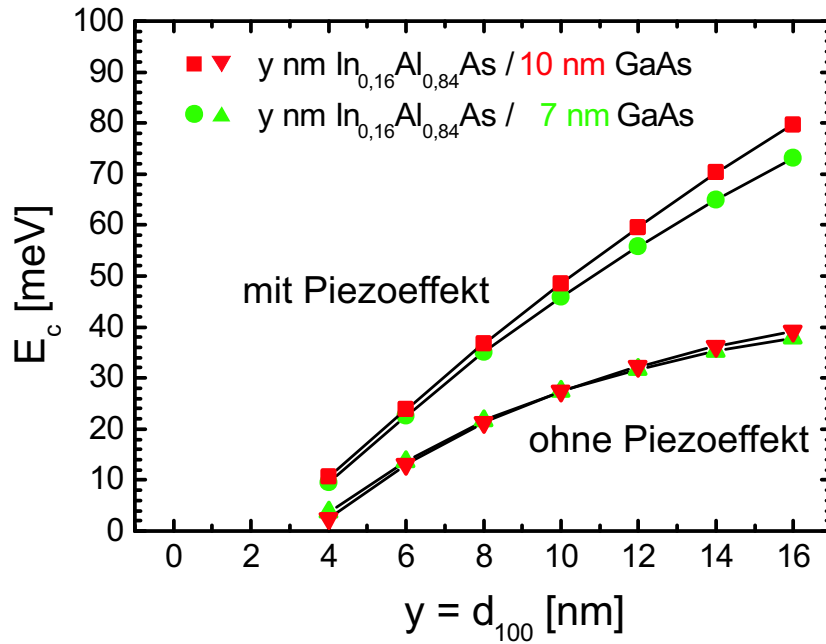


Abbildung 25: Abhängigkeit der berechneten Einschlussenergie E_c von der Dicke d_{100} der verspannten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage. Die Linien dienen der Orientierung.

tiges Ergebnis der Simulationen folgt also, dass das Konzept verspannungsinduzierter Quantendrähte dazu geeignet ist, hohe Einschlussenergien E_c zu erzielen. Alternative Strukturen, die unter anderem einen noch stärkeren Ladungsträgereinschluss ermöglichen, werden in Abschnitt 8.2 diskutiert.

3.8 Zusammenfassung

Das in diesem Abschnitt vorgestellte Programm **nextnano³** ist in der Lage, die an einer verspannten Kreuzung auftretenden Verzerrungen innerhalb der Elastizitätstheorie zu berechnen und erlaubt weiterhin, Bandkantenverläufe und Wellenfunktionen zu bestimmen. Unter Verwendung des aufgelisteten Parametersatzes können aus den ermittelten Eigenenergien die Einschlussenergien näherungsweise berechnet werden.

Einen zentralen Punkt der vorliegenden Arbeit stellt das diskutierte Konzept der verspannungsinduzierten Quantendrähte dar. Die neue Idee im Probenaufbau, durch eine $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage im $[100]$ -Wachstum eine lokale tensile Verzerrung im überwachsenen Quantenfilm zu erzeugen, lässt hohe Einschlussenergien erwarten. Dazu wurden für eine konkrete Strukturgeometrie die lokalen Verspannungsmodulationen im (011) -Quantenfilm berechnet. Diese Verzerrungen beeinflussen unmittelbar Leitungs- und

Valenzband und es ergeben sich Wellenfunktionen, die nicht mehr die Symmetrie der Kreuzung aufweisen.

Der piezoelektrische Effekt sorgt für eine örtliche Trennung von Elektronen und Löchern und erhöht die Einschlussenergie der Quantendrähte. Diese entstehen bei der vorgestellten Strukturgeometrie nachweislich rein verspannungsinduziert, da keine gebundenen Zustände mehr existieren, sobald in den Simulationen die Einflüsse von Verzerrungen vernachlässigt werden.

Quantitative Untersuchungen zur Optimierung der Strukturparameter ergaben systematische Abhängigkeiten der Einschlussenergie von der Dicke und der Materialzusammensetzung der (100)- und (011)-Filme. Diese Simulationen prognostizieren einen Wert von annähernd 80 meV, wenn die Quantendrähte an der Kreuzung einer 16 nm breiten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schicht mit einer 10 nm dicken GaAs-Lage gebildet werden.

4 Experimentelle Grundlagen

Dieses Kapitel geht auf wesentliche Aspekte der Herstellung und Charakterisierung von Quantendrahtstrukturen ein und stellt dabei zunächst die Methode des Überwachsens von Spaltflächen vor. Danach werden die Einflüsse der Rauigkeiten an den Heterogrenzflächen auf die optischen Eigenschaften behandelt und die Einzelheiten des verwendeten Mikro-Photolumineszenz-Messplatzes diskutiert. Die letzten beiden Abschnitte widmen sich der räumlichen und spektralen Auflösung des Aufbaus sowie der Software, die für die Geräteansteuerung und die Datenauswertung programmiert wurde.

4.1 Überwachsen von Spaltflächen

Alle in dieser Arbeit untersuchten Strukturen wurden am Lehrstuhl von Professor Wegscheider in Regensburg von Werner Wegscheider, Peter Tranitz und Matthias Reinwald bzw. am Walter-Schottky-Institut in Garching von Dieter Schuh und Max Bichler mittels Molekularstrahlepitaxie hergestellt. Dieses seit den 1970er Jahren angewendete Verfahren erlaubt das atomlagengenaue Wachstum von Halbleitermaterialien auf monokristallinen Substraten. Mehrere Effusionszellen, darunter solche, die Gallium, Aluminium und Arsen enthalten, befinden sich im Ultrahochvakuum. Durch separate Kontrolle der Temperatur jeder Zelle ist die Verdampfungsrate sehr genau einstellbar. Damit wird der Fluss der Moleküle bzw. Atome festgelegt, die am Substrat abgeschieden werden und so den Kristall Schicht um Schicht erweitern. Auf diese Weise kann man binäre, ternäre und quaternäre Strukturen mit atomarer Präzision herstellen [Yup96].

Im vorliegenden Fall wurden Gruppe-III-Arsenide auf GaAs-Substraten abgeschieden. Üblich beim [100]-Wachstum ist eine Substrattemperatur im Bereich von 580 bis 640 °C, ein Arsen-(As₄)-Partialdruck von etwa 10⁻⁵ mbar und Wachstumsraten von 1 und 0,5 μm/h für GaAs bzw. AlAs [Weg97a]. Für indiumhaltige Schichten muss die Substrattemperatur auf unter 500 °C gesenkt werden, um die Diffusion zu verringern. Es ist zweckmäßig, diese Temperatur auch für Zwischenschichten aus GaAs und AlAs beizubehalten.

Während in den meisten Anwendungen das Wachstum entlang der [100]-Richtung erfolgt, muss man zur Herstellung T-förmiger Quantendrähte auch das [011]-Wachstum beherrschen. Dabei sind die Oberflächenmorphologien, die unter den Bedingungen des [100]-Wachstums erzielt werden, nicht zufriedenstellend. Insbesondere eignen sich diese Proben nicht für optische Untersuchungen. Die Ursache dafür liegt in dem vergleichs-

weise geringen Haftkoeffizienten der Arsen-Moleküle auf den unpolaren (011)-Flächen. Aus diesem Grund muss beim [011]-Wachstum die Substrattemperatur auf etwa 480 °C gesenkt und der Arsen-Partialdruck verdoppelt werden. Deshalb sind die unvermeidbaren Grenzflächenrauigkeiten in dieser Wachstumsrichtung wesentlich ausgeprägter als in der konventionellen [100]-Richtung. Dies äußert sich unmittelbar in einer größeren Photolumineszenz-Linienbreite und wird in Abschnitt 4.3 diskutiert. Außerdem wählt man die Temperatur der Effusionszellen so, dass die Wachstumsraten in [011]-Richtung nur etwa halb so groß sind wie für das [100]-Wachstum.

Die technologische Realisierung T-förmiger Quantendrähte basiert auf dem Überwachsen von Spaltflächen (CEO, engl.: cleaved edge overgrowth). Dieses Verfahren wurde im Jahr 1990 von Pfeiffer *et al.* eingeführt und beruht auf der Eigenschaft, dass in Zinkblendestruktur kristallisierende Halbleiter wie GaAs, AlAs und InAs senkrecht zur [011]-Richtung über makroskopische Distanzen atomar glatt gespalten werden können [Pfe90].

In Abbildung 26 ist dargestellt, wie in einem ersten Schritt entlang der [100]-Richtung beispielsweise ein GaAs-Quantenfilm entsteht. Im Anschluss daran wird die Halbleiterscheibe aus der Wachstumskammer ausgeschleust und von der Substratseite aus mit einer 12-prozentigen Brom-Methanol-Lösung auf ca. 100 μm gedünnt. Man zerteilt die Scheibe in etwa $6,5 \times 7 \text{ mm}^2$ große Stücke, welche am Rand mit einem 0,95 mm langen Ritz versehen werden. Dieses Anritzen erfolgt mit einem computergesteuerten Ritztisch

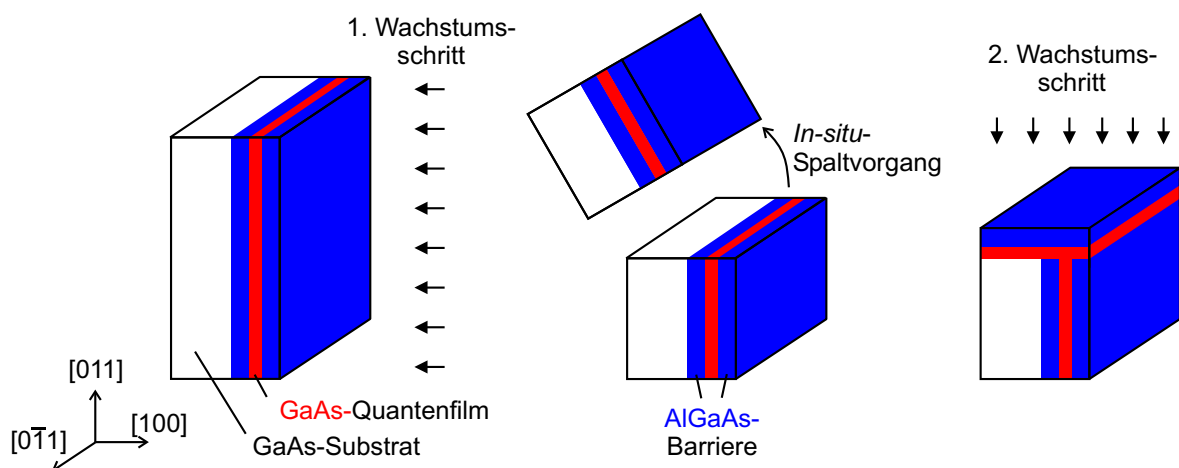


Abbildung 26: Beim Überwachsen von Spaltflächen wird nach dem [100]-Wachstum eine atomar glatte Spaltfläche freigelegt, auf der innerhalb weniger Sekunden der zweite Wachstumsschritt beginnt.

und legt die Sollbruchstelle für den Spaltvorgang fest. Nach der Reinigung in Aceton und Methanol werden bis zu fünf Stücke auf einem speziellen Probenhalter, der in Abbildung 27 zu sehen ist, befestigt. Ein Gallium-Film auf der Rückseite (bezüglich des ersten Wachstumsschritts) sorgt dabei für das Haften der Probe und für einen guten Wärmekontakt mit dem Halter. Dieser wird in der Vorkammer für mehrere Stunden bei einer Temperatur von etwa 400 °C ausgeheizt und danach in die Wachstumskammer transferiert.

Schließlich führt man die letzten beiden Schritte des CEO-Verfahrens durch (siehe Abbildung 26): Mit einem drehbaren Spaltbügel aus Tantal (vergleiche Abbildung 27) werden die Proben *in situ* an den Sollbruchstellen gespalten. Unmittelbar danach startet das [011]-Wachstum auf der soeben freigelegten, atomar glatten Spaltfläche.

Neben dem CEO-Verfahren gibt es weitere Herstellungsmethoden. Man kann zum Beispiel mittels Lithographie und Ätzen aus Quantenfilmen relativ einfach Quantendrähte anfertigen. Deren Grundzustandsenergie liegt bedingt durch die zusätzliche räumliche Einschränkung über der des Quantenfilms. Anders als bei CEO-Quantendrähten treten bei diesen Strukturen wegen der freistehenden Seitenwände viele Defekte auf. Die optischen Eigenschaften des Systems sind dann aufgrund der Oberflächenrekombination und -lokalisierung eingeschränkt [Cin91].

Im Gegensatz dazu weisen Quantendrähte, die sich beim epitaktischen Wachstum auf vorstrukturierten Substraten bilden, keine freiliegenden Wände auf. Solche eindimensionalen Systeme können beim Wachstum eines Quantenfilms an der tiefsten Stelle eines V-förmigen Grabens entstehen [Kap97]. Der Nachteil gegenüber CEO-Strukturen ist, dass durch die Vorstrukturierung Größenfluktuationen auftreten, die die aus der

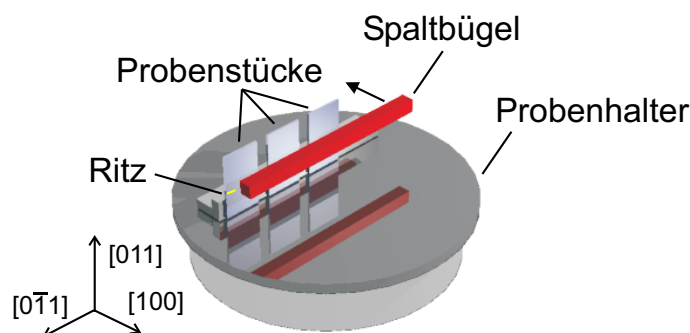


Abbildung 27: Spezieller Probenhalter, der das *In-situ*-Spalten von Proben in der Wachstumskammer ermöglicht. Der Spaltbügel trifft die Proben, die von den angeritzten Stellen aus atomar glatt brechen.

Niedrigdimensionalität resultierenden Effekte überlagern können [Weg97a]. Diese und weitere Herstellungsverfahren, wie das Wachstum auf gekippten Substraten, werden in der vorliegenden Arbeit nicht behandelt.

Einige Beispiele für die verschiedenartigen CEO-Strukturkonzepte findet man in Referenz [Sch04b]. Hier werden insbesondere auch nulldimensionale Quantenpunktsysteme diskutiert, die durch zweifaches Überwachsen von Spaltflächen in $[011]$ - und $[0\bar{1}1]$ -Richtung entstehen. So konnten Schedelbeck *et al.* durch die Herstellung einzelner Quantenpunkte sowie gekoppelter Paare den Übergang vom „künstlichen Atom“ zum „Molekül“ studieren [Sch97, Weg97b].

Abbildung 28(a) zeigt für eine CEO-Struktur die lichtmikroskopische Aufnahme einer überwachsenen (011) -Spaltfläche. Die Oberfläche ist glatt und ohne sichtbare Stufen,

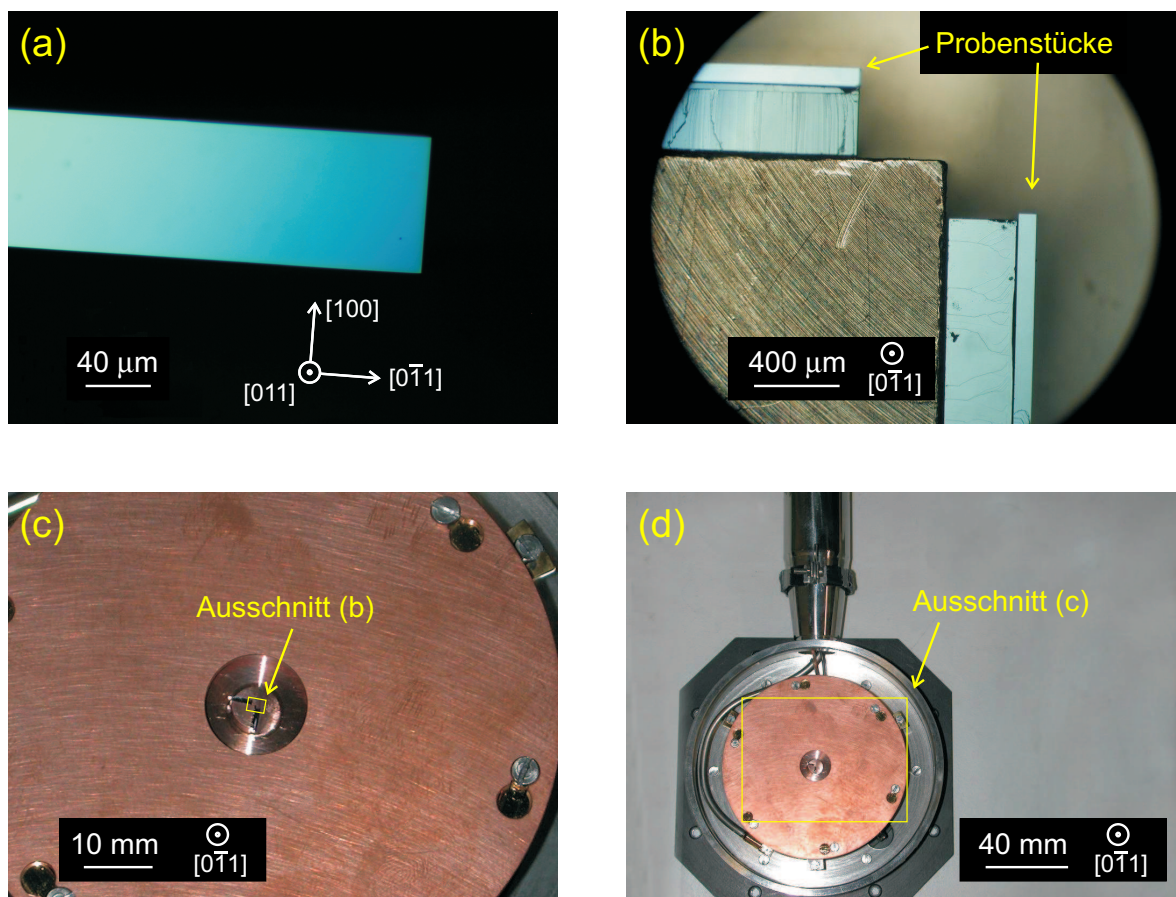


Abbildung 28: (a) Überwachsene (011) -Spaltfläche einer CEO-Probe. (b)-(d) Zwei Probenstücke sind mit nach oben zeigender (011) -Fläche in den Kryostaten eingebaut. Sie befinden sich auf Hilfsprobenstücken, die am Probenhalter kleben.

die auf Probleme beim Spaltvorgang hinweisen würden. In den Kapiteln 5 bis 7 werden die Ergebnisse optischer Experimente präsentiert, die die T-förmigen Quantendrähte in ihrem Querschnitt abrastern. Vor diesen Untersuchungen wurden die Probenstücke deshalb durch *Ex-situ*-Spalten weiter unterteilt, wobei die auf der frischen $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche einsetzende Oxidation die optischen Messungen nicht beeinträchtigte.

Zwei dieser Teilstücke (mit $(0\bar{1}1)$ -Flächen in der Zeichenebene) sind in Abbildung 28(b) zu sehen. Beide kleben mit Vakuumfett an dickeren Hilfsprobenstücken, die wiederum am Probenhalter befestigt sind. In den Teilbildern (c) und (d) kann man erkennen, wie der Halter bereits in den Kryostaten eingebaut ist. Auf diese Weise sind die Proben in den Versuchsaufbau integriert, der in Abschnitt 4.4 beschrieben wird.

4.2 Optische Eigenschaften

Die mit Molekularstrahlepitaxie unter Verwendung des CEO-Verfahrens hergestellten Proben wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit optisch untersucht. Für diese Versuche zur Bestimmung von Einschlussenergien wurde ein Mikro-Photolumineszenz-Aufbau verwendet. Das folgende Kapitel stellt die Grundlagen dieser experimentellen Methode vor, wobei auch auf die Effekte niedrigdimensionaler Systeme eingegangen wird.

Der Prozess der Photolumineszenz setzt sich aus drei Einzelschritten zusammen, die anhand von Abbildung 29 verdeutlicht werden. Hier ist der für Halbleiter mit direkter Bandlücke wichtige Bereich in der Nähe des Γ -Punkts wiedergegeben.

Laserlicht mit der Anregungsenergie (engl.: excitation energy) E_{exc} trifft auf die Probe. Durch Absorption dieser Photonen wird ein Elektron-Loch-Paar gebildet (1). Elektron und Loch befinden sich in angeregten Zuständen, da E_{exc} größer als die Bandlücke E_{gap} ist. In Schritt (2) relaxieren die Ladungsträger zu den jeweiligen Bandkanten. Dabei können aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung Exzitonen entstehen (2a). Die Energieniveaus für diese zweikomponentigen Quasiteilchen sind außerhalb des Einteilchenbilds eingezeichnet und zeigen die Exziton-Bindungsenergie $E_{B,X}$. Im abschließenden Schritt rekombiniert das ungebundene (3) oder gebundene (3a) Ladungsträgerpaar. Das bei diesem Prozess ausgesendete Photon der Energie E_{PL} wird als Photolumineszenz-Signal (PL-Signal) detektiert. In Quantenfilmen oder -drähten müssen neben der Bandlückenenergie E_{gap} auch die quantisierten Eigenenergien nach den Gleichungen (6) und (7) sowie (10) und (11) (siehe Seiten 9 und 12) berücksichtigt werden.

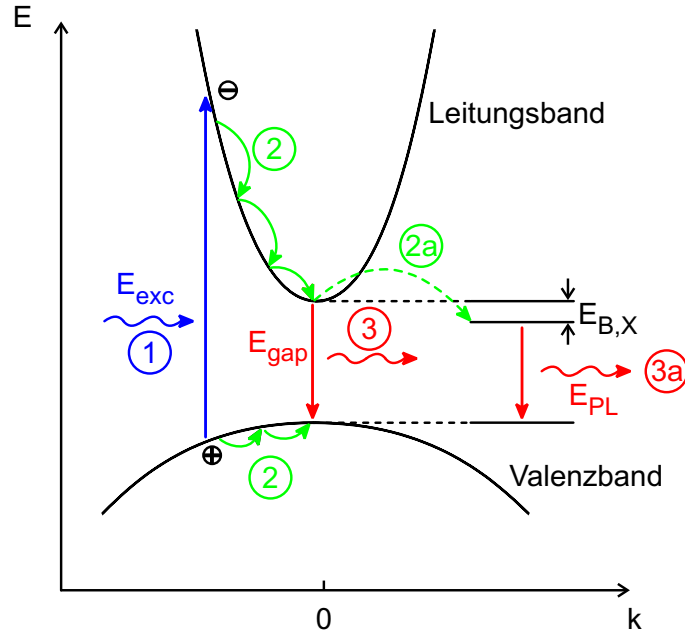


Abbildung 29: Die grundlegenden Schritte des Photolumineszenz-Prozesses sind Anregung (1), Relaxation (2) und Exziton-Bildung (2a) sowie Emission (3 und 3a).

Die Energieabgabe bei der Relaxation zu den Bandkanten geschieht innerhalb sehr kurzer Zeiten (etwa 1 ps) und wird für die hier vorliegenden geringen Ladungsträgerdichten von der Elektron-Phonon-Streuung (bzw. Exziton-Phonon-Streuung) dominiert [Boc94]. Über die Deformationspotential- und Fröhlich-Wechselwirkung können Elektronen an akustischen und optischen Phononen gestreut werden. Da die Emission durch die strahlende Lebensdauer von etwa 1 ns charakterisiert wird, befindet sich die Mehrzahl der Ladungsträger unmittelbar vor der Rekombination am Γ -Punkt bzw. im Exziton-Grundzustand.

Mit Fermis Goldener Regel können die Lebensdauern τ für den Emissions- und den Absorptionsprozess berechnet werden [Kel95]:

$$\tau^{-1} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_I | i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f \pm \hbar\omega), \quad (44)$$

wobei das Plus-(Minus-)Zeichen die Absorption (Emission) beschreibt. Mit H_I ist der Wechselwirkungs-Hamiltonoperator (engl.: interaction Hamiltonian) bezeichnet, welcher den anfänglichen Zustand (engl.: initial state) $|i\rangle$ mit zugehöriger Energie E_i in den Endzustand (engl.: final state) $|f\rangle$ mit der Energie E_f überführt. Die Energie der periodischen Störung beträgt $\hbar\omega$.

Im Folgenden wird der Übergang eines Elektrons vom Valenz- ins Leitungsband betrachtet (Schritt (1) in Abbildung 29). Für den Fall, dass ein elektromagnetisches Feld

mit der elektrischen Feldstärke F die Störung bewirkt, gilt in linearer Näherung für den Wechselwirkungs-Hamiltonoperator [Bas96]:

$$H_I = \frac{ieF}{4m_0\omega} \left(\vec{\eta} \cdot \vec{p} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} + e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \vec{\eta} \cdot \vec{p} \right), \quad (45)$$

wobei e die Elementarladung, m_0 die Ruhemasse des Elektrons, ω die Kreisfrequenz der Störung, $\vec{\eta}$ der Polarisationsvektor, \vec{p} der Impulsoperator und \vec{q} der Photonen-Wellenvektor ist.

Durch Einsetzen von Gleichung (45) in (44) erhält man die Übergangsrate τ^{-1} für die Absorption. Analog folgt der Ausdruck für die stimulierte Emission. In allen Fällen, also auch bei der spontanen Emission, die in der klassischen Behandlung des elektromagnetischen Felds vernachlässigt wird, kommt dem Matrixelement

$$M = \int \Psi_f^* \vec{\eta} \cdot \vec{p} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \Psi_i d\vec{x} \approx \int \Psi_f^* \vec{\eta} \cdot \vec{p} \Psi_i d\vec{x}$$

eine zentrale Bedeutung zu. Die Näherung nutzt dabei die Tatsache aus, dass im sichtbaren Spektralbereich $|\vec{q}|$ klein gegenüber der Ausdehnung der Brillouinzone ist. Somit werden nur vertikale Übergänge betrachtet.

Für niedrigdimensionale Systeme wie zum Beispiel Quantenfilme kann innerhalb der Effektive-Masse-Näherung die Wellenfunktion Ψ nach Gleichung (5) auf Seite 8 als Produkt von $u(\vec{x})$ und $\varphi(\vec{x})$ geschrieben werden. Der gitterperiodische Anteil der Blochfunktion am Brillouinzentrum $u(\vec{x})$ oszilliert schnell. Im Gegensatz dazu variiert die einhüllende Wellenfunktion $\varphi(\vec{x})$ innerhalb einer Elementarzelle (EZ, mit Volumen V_{EZ}) nur langsam. Deshalb kann man $\varphi(\vec{x})$ dort als näherungsweise konstant ansehen und obige Gleichung in folgender Weise als Produkt schreiben:

$$M = \frac{1}{V_{EZ}} \int \varphi_{hh}^*(\vec{x}) \varphi_e(\vec{x}) d\vec{x} \cdot \int_{EZ} u_v^*(\vec{x}) \vec{\eta} \cdot \vec{p} u_c(\vec{x}) d\vec{x}.$$

Wieder stehen die Indizes e und hh für Elektron und Schwerloch sowie c und v für Leitungs- und Valenzband. Ist $M = 0$, gilt nach Gleichung (44) auch $\tau^{-1} = 0$. Die unendliche Lebensdauer τ führt zu einer Auswahlregel, die den betreffenden Übergang verbietet. Wichtig ist dabei, zwei Arten von Auswahlregeln zu beachten. Zum einen selektiert der Überlapp der einhüllenden Wellenfunktionen im ersten Integral die Quantenzahlen des Anfangs- und Endzustands in Richtung des Einschlusspotentials der niedrigdimensionalen Struktur. Zum anderen folgen Auswahlregeln für die Polarisation aus dem zweiten Integral, das die gitterperiodischen Anteile der Blochfunktionen am Mittelpunkt der Brillouinzone enthält.

Zum Beispiel sind für Quantenfilme Elektron-Schwerloch-Übergänge dreimal wahrscheinlicher als Elektron-Leichtloch-Übergänge [Bas96]. Für die erstgenannten ist bei

einer Lichtausbreitung in der Quantenfilmebene die Polarisierung in Richtung des Einschlusspotentials unterdrückt. Allgemein werden Übergänge zwischen Subbändern gleicher Quantenzahl bevorzugt. In den freien Richtungen, in denen keine Quantisierung vorliegt, sind die einhüllenden Wellenfunktionen ebene Wellen.

4.3 Grenzflächenrauigkeiten

Wachstum und optische Eigenschaften, die in den beiden vorangegangenen Kapiteln diskutiert wurden, stehen in einem engen Zusammenhang. Eine wichtige Rolle spielen dabei Monolagenfluktuationen an Heterogrenzflächen. Wie diese Grenzflächenrauigkeiten die Linienbreite beeinflussen, zu zusätzlichen Signalen im Spektrum führen und zu einer Energieverschiebung zwischen Absorption und Emission beitragen können, wird im folgenden Abschnitt dargelegt.

Alle Übergänge werden durch eine endliche Linienbreite Γ bei der optischen Emission charakterisiert. Diese setzt sich aus einem homogenen und einem inhomogenen Anteil zusammen:

$$\Gamma = \Gamma_{\text{hom}} + \Gamma_{\text{inhom}}.$$

Die homogene Linienbreite zeigt einen lorentzförmigen Verlauf und ist über $\Gamma_{\text{hom}} = \hbar/\tau$ mit der Lebensdauer τ verknüpft. Die Größe von τ ergibt sich aus den Lebensdauern für die strahlende Rekombination, die Streuung an akustischen und optischen Phononen, die Streuung von Exzitonen an Exzitonen und an Ladungsträgern sowie für die Spinflip-Streuung [Sri92].

Hingegen ist die inhomogene Linienbreite mit einem Gaußprofil verknüpft. Diesem Verbreiterungsmechanismus liegen Abweichungen von der Idealstruktur zugrunde, wie zum Beispiel Störstellen. Für die in dieser Arbeit betrachteten niedrigdimensionalen Systeme spielen Fluktuationen in der Strukturgröße L eine wichtige Rolle [Wei81]. Beträgt deren mittlere Variation ΔL und beschreibt $\frac{\partial E_{\text{PL}}}{\partial L}$ die Änderung der Emissionsenergie mit L , dann gilt [Sri92]:

$$\Gamma_{\text{inhom}} = \left| \frac{\partial E_{\text{PL}}}{\partial L} \Delta L \right|.$$

Fluktuationen in der Strukturgröße treten in Halbleiterheterostrukturen zum Beispiel als Grenzflächenrauigkeiten auf. Wie deren Eigenschaften Breite und Form des detektierten Signals beeinflussen können [War90], soll mit Hilfe der Skizzen in Abbildung 30 verdeutlicht werden. Die Bilder zeigen Fluktuationen auf unterschiedlichen Längenskalen. Finden die Variationen der Monolagendicke wie in der Skizze links gezeigt auf

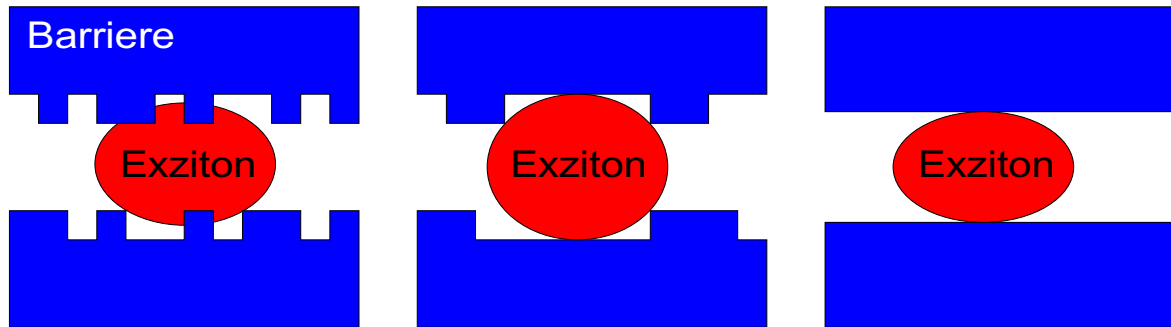


Abbildung 30: Von links nach rechts nimmt die Stärke der Grenzflächenrauigkeiten an den Heteroübergängen ab. Nur wenn die Monolagenfluktuationen auf einer Skala auftreten, die mit dem Exziton-Bohrradius vergleichbar ist (mittleres Bild), kann es zur Exziton-Lokalisierung kommen.

einer Skala statt, die klein gegenüber dem Exziton-Bohrradius ist, so werden sich die Quasiteilchen im Potential einer gemittelten Quantenfilmdicke bewegen. Dieser Fall tritt bei den in Kapitel 7 vorgestellten Proben auf.

Eine Lokalisierung, wie sie im mittleren Bild zu sehen ist, wird möglich, wenn es Grenzflächenrauigkeiten auf der Skala des Exziton-Durchmessers gibt. Das Entstehen dieser natürlichen Quantenpunkte wird wegen des schwerer beherrschbaren [011]-Wachstums vor allem bei überwachsenen Quantenfilmen erwartet. In orts aufgelösten Messungen sollten sich dann aufgrund der in allen Raumrichtungen lokalisierten Exzitonen scharfe Spitzen im Spektrum zeigen. Jedoch kann man auch in den Signalen von (100)-Quantenfilmen derartige Signaturen beobachten, wie in zahlreichen Veröffentlichungen gezeigt wurde [Bru94, Hes94, Zre94, Gam96, Hel98].

Des Weiteren sind in Abbildung 30 rechts perfekte Grenzflächen dargestellt. Für das Wachstum in der unkonventionellen [011]-Richtung können derartig glatte Übergänge auf einer Länge von mehreren Mikrometern mit Hilfe eines neuen Verfahrens erzielt werden, das in Abschnitt 8.1 vorgestellt wird [Yos01a, Yos02].

Während die Linienbreite einer von Grenzflächenrauigkeiten abhängigen inhomogenen Verbreiterung unterliegt, wird die energetische Lage des PL-Signals eines unverspannten Quantenfilms von der Schichtdicke des gewählten Materials und der Barrierenhöhe bestimmt. In Photolumineszenz-Experimenten dominieren bei geringen Anregungsleistungen vereinzelte Potentialminima die Emission, da die Ladungsträger in den energetisch tiefsten Zustand relaxieren und von dort aus rekombinieren. Hingegen wird mit Absorptionsmessungen das mittlere Potential untersucht, da hier die reduzierte Zu-

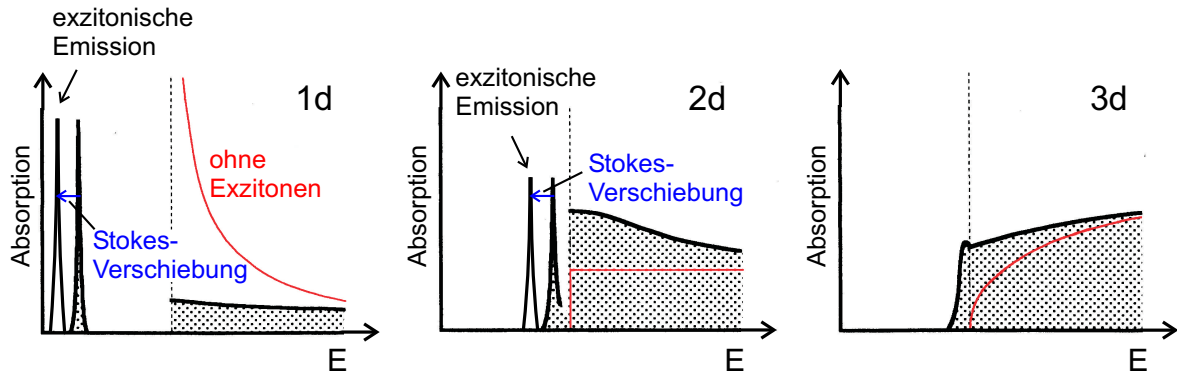


Abbildung 31: Schematische Darstellung der Emission und Absorption in ein-, zwei- und dreidimensionalen (1d, 2d, 3d) Systemen (nach [Oga95]). Die Stokesverschiebung ist eine Folge der Grenzflächenrauigkeiten in niedrigdimensionalen Strukturen. Exzitonen beeinflussen auch die Band-zu-Band-Absorption, wie der Vergleich mit den roten Kurven zeigt.

standsdichte wichtig ist. Daher muss man beachten, dass die in dieser Arbeit durchgeführten Photolumineszenz-Messungen eine energetische Rotverschiebung gegenüber Absorptionsexperimenten aufweisen können. Dieser als Stokesverschiebung bezeichnete Energieunterschied nimmt systematisch mit der Linienbreite des Absorptionssignals zu [Yan93]. Da die Stokesverschiebung ihren Ursprung in den Grenzflächenrauigkeiten hat, ist sie für Proben mit [011]-Wachstumsrichtung größer als für Strukturen mit [100]-Orientierung. In Abbildung 31 ist die resultierende Rotverschiebung der exzitonischen Emission gegenüber der Absorption in ein- und zweidimensionalen Heterostrukturen dargestellt.

Generell spielen bei tiefen Temperaturen exzitonische Effekte eine wichtige Rolle. Exzitonen bewirken aber nicht nur das Auftreten zusätzlicher Resonanzen innerhalb der Bandlücke, sondern haben auch einen Einfluss auf die Band-zu-Band-Absorption.

In Abbildung 31 gelten im Einteilchenbild, also ohne Berücksichtigung von Exzitonen, die roten Linien. Die Kurven korrespondieren mit der in Abbildung 7 auf Seite 16 aufgetragenen reduzierten Zustandsdichte. Diese wird jedoch in Anwesenheit von Exzitonen durch die vorhandene Coulomb-Wechselwirkung modifiziert. Das Verhältnis der Interbandabsorptionen mit und ohne Berücksichtigung von Exzitonen nennt man Sommerfeldfaktor. Im Graphen kann man für den drei- und zweidimensionalen Fall eine verstärkte Band-zu-Band-Absorption erkennen, während in eindimensionalen Systemen der Sommerfeldfaktor kleiner eins, die Absorption also verringert ist [Oga95].

4.4 Beschreibung des Mikro-Photolumineszenz-Aufbaus

Grundlage der in diesem Abschnitt beschriebenen Versuchsanordnung ist die konfokale Mikroskopie, die heute auch im Bereich der Materialwissenschaften und der Biologie eingesetzt wird. Sie zeichnet sich durch eine hohe Ortsauflösung verbunden mit einer geringen Tiefenschärfe aus und ermöglicht so die dreidimensionale Abbildung räumlicher Strukturen. Entsprechend der Bezeichnung „konfokal“ fallen bei diesem Mikroskop Anregungs- und Detektionsfokus zusammen, welche im idealen Fall beugungsbegrenzt sind. Die Auflösung wird dabei vorwiegend durch die Numerische Apertur (NA) des verwendeten Mikroskopobjektivs bestimmt:

$$\text{NA} = n \sin \theta.$$

Dabei bezeichnet n den Brechungsindex des Mediums zwischen Probe und Objektiv und θ den halben Öffnungswinkel, unter dem Licht von der Probe in das Objektiv trifft. Der Einsatz von Ölimmersionsobjektiven oder Immersionslinsen ermöglicht NA-Werte größer als eins. Dies ist für die laterale Auflösung R eines Mikroskops von Vorteil, da der bestmögliche Wert von R durch

$$R = r \frac{\lambda}{\text{NA}} \quad (46)$$

gegeben ist, falls man Licht der Wellenlänge λ verwendet. Für den Vorfaktor r gibt es verschiedene Konventionen. So liefert die Auswertung des Rayleighkriteriums, das eine Entfernung zwischen zwei Beugungsscheiben (Airyfunktion) von mindestens ihrem Radius fordert, unter Annahme einer inkohärent strahlenden Punktquelle den Wert $r = 0,61$ [Cor96]. Wird hingegen kohärentes Laserlicht mit gaußförmigem Strahlprofil fokussiert und der Abfall der Intensität auf $1/e^2$ des Maximalwerts betrachtet, so gilt $r = 0,64$ [Osh85]. Da dies nahezu dem Rayleighkriterium entspricht und man Gleichung (46) nur für Abschätzungen der experimentell bestimmten Größen braucht, genügt es, für die Auflösung die Beziehung

$$R = 0,64 \frac{\lambda}{\text{NA}} \quad (47)$$

zu verwenden. Um Informationen nicht nur an einem Punkt, sondern für die gesamte untersuchte Probe zu erhalten, ist eine Rasterung notwendig. Während in der Biologie beispielsweise durch den gezielten Einsatz von Fluoreszenzmarkern dynamische Prozesse ortsaufgelöst beobachtet werden können, ist die konfokale Mikroskopie in der Halbleiterphysik speziell zur Untersuchung von Nanostrukturen geeignet. Als Voraussetzung für die Charakterisierung der niedrigdimensionalen CEO-Proben war die Realisierung eines solchen experimentellen Aufbaus ein wichtiger Teil der vorliegenden Arbeit.

Der Messplatz wurde zur Schwingungsdämpfung auf einem mit Druckluft gelagerten optischen Tisch (Newport, RS 4000) angeordnet. Der Versuchsaufbau ist bestimmt für Mikro-Photolumineszenz-Messungen in Rückstrahlanordnung. In Abbildung 32 kann man eine schematische Skizze des Messplatzes sehen, der zur Beobachtung des spektral zerlegten Signals in Abhängigkeit vom Probenort dient.

Ein diodengepumpter und frequenzverdoppelter Neodym-Yttriumvanadat-(Nd:YVO₄-) Festkörperlaser (Spectra-Physics, Millennia) pumpt einen Titan-Saphir-(Ti³⁺:Al₂O₃-) Laser (Spectra-Physics, 3900S) optisch mit einer Leistung von bis zu 5 W bei einer Wellenlänge von 532 nm. Dieser zur Anregung genutzte Laser ist bei Verwendung von zwei Spiegelsätzen mit Hilfe eines im Resonator (engl.: intra cavity) eingebauten Systems aus drei doppelbrechenden Kristallen innerhalb des Wellenlängenbereichs von 700 bis 1000 nm durchstimmbar. Dabei nutzt man aus, dass im Resonator vorwiegend linear polarisiertes Licht verstärkt wird. Die Winkelstellung der doppelbrechenden Kristalle bestimmt die Wellenlänge des Lichts, das linear polarisiert passieren kann. Auf diese Weise ist eine genaue Wellenlängenselektion möglich, wobei die Winkelvariation über eine Mikrometerschraube erfolgt, die durch einen rechnergesteuerten Schrittmotor angetrieben wird.

Die Linsen L1 (Brennweite $f = 89$ mm) und L2 ($f = 250$ mm) fungieren als Teleskop. Sie dienen dazu, die Strahldivergenz zu minimieren und den Strahl auf etwa 3 mm aufzuweiten, so dass er die Apertur des Mikroskopobjektivs (siehe unten) voll ausleuchtet. Im Strahlengang befindet sich ein Doppelfilterrad, das durch die Kombination verschiedener Neutralglas-Dichtefilter eine stufenweise Reduktion der Anregungsleistung erlaubt. Durch die Leistungsregelung am Pumplaser ist eine kontinuierliche Variation der Laserintensität möglich. Die Leistung des Strahls kann an jeder Stelle durch Einbringen eines Messkopfs (Coherent, LM-2) kontrolliert werden.

Nach dem Doppelfilterrad folgen zwei Spiegel, die nützlich für die Justierung sind. Der Fresnelrhombus PD1 erlaubt die Drehung des linear polarisierten Laserlichts um beliebige Winkel. In Kombination mit dem zweiten Polarisationsdreher (PD2) und einem Polarisationsfilter (Analysator) vor dem Doppelmonochromator werden polarisationsabhängige Messungen ermöglicht.

Die Leistungsstabilisierung ist eine Option für geplante Photolumineszenz-Anregungsmessungen, bei denen die Laserwellenlänge kontinuierlich variiert wird. Da die Laserintensität wellenlängenabhängig ist, muss man anhand der gemessenen Leistung des ausgekoppelten Strahls die Pumpleistung nachregeln. Zusätzlich sorgt die gewählte Konfiguration dafür, dass ausgekoppelter und anregender Strahl analoge Wege durchlaufen,

Saphirfenster mit 8 mm Durchmesser hat. Sie befindet sich dabei in einem Isolationsvakuum von etwa 10^{-6} mbar, das von einer Kombination aus ölfreier Membran-Vorpumpe (Pfeiffer, MVP015) und einer Turbomolekularpumpe (Pfeiffer, TMU071P) erzeugt und durch Pirani- und Penning-Messzellen kontrolliert wird. Die Standardtemperatur bei Messungen beträgt 5 K und wird mit Hilfe eines Nadelventils, das den Helium-Fluss steuert, eingestellt. Zusätzlich überwacht ein Temperaturregler (Lake Shore, Modell 321) das Heizen der Probe auf die gewünschten Temperaturen.

Für die Photolumineszenz-Experimente wurde die Standardorientierung der Probe so gewählt, dass sich die (0 $\bar{1}1$)-Oberfläche senkrecht zum einfallenden Laserstrahl befindet und somit abgerastert werden kann (vergleiche Abbildung 28). Der Kryostat ist auf einem Piezoverschiebetisch (Physik Instrumente, P-517.3CD) angebracht, der wiederum auf einem mikrometergenau verschiebbaren XYZ-Tisch zur Grobpositionierung befestigt ist. Um die zulässige Belastung des Piezoverschiebetischs von 5 kg nicht zu überschreiten, wurde der Kryostat an seinem Schwerpunkt mit einer Feder aufgehängt, was die Gewichtsbelastung weitgehend kompensiert. Die Piezoelemente besitzen dann eine Positioniergenauigkeit von ± 40 nm und können horizontal um maximal $100\text{ }\mu\text{m}$ sowie vertikal um bis zu $20\text{ }\mu\text{m}$ verschoben werden.

Mit der beschriebenen Konfiguration wird bei Rasterungen die Probe verfahren, während der Anregungsfokus ortsfest bleibt. Der Anregungsfokus ist aber zugleich auch der Detektionsfokus des konfokalen Abbildungssystems. Durch die Kombination von Objektiv und Linse L3 ($f = 250$ mm) ergibt sich ein etwa hundertfach vergrößertes Bild der Probenoberfläche. Letztere kann man über einen einklappbaren Spiegel auf eine CCD-Kamera („CCD“ steht für „ladungsgekoppeltes Bauelement“, engl.: charge-coupled device) abbilden und auf einem Monitor vergrößert beobachten (nicht gezeigt). Auf diese Weise wird die Orientierung auf der Probenoberfläche und die Grobpositionierung bezüglich des Laserfokus ermöglicht.

Entfernt man den Klappspiegel aus dem Strahlengang, befindet sich in der Bildebene von Linse L3 ein Nadelloch (engl.: pinhole) mit einem Durchmesser von $100\text{ }\mu\text{m}$, das eine räumliche Filterung bewirkt und so sicherstellt, dass ausschließlich Licht vom Anregungsfokus in den Doppelmonochromator (Jobin Yvon, U1000) gelangen kann. Um dessen maximale Auflösung nutzen zu können, sind die Linsen L4 ($f = 500$ mm) und L5 ($f = 63$ mm) zwischengeschaltet, die für die nötige Anpassung an die Numerische Apertur des Doppelmonochromators ($\text{NA} = 0,0625$) sorgen, so dass die Gitter (je 600 Linien/mm) optimal ausgeleuchtet werden. Dabei wird das nach Linse L4 parallele Licht mittels L5 auf den $15\text{ }\mu\text{m}$ breiten Eintrittsspalt des Doppelmonochromators fokussiert. Durch das Einbringen eines Klappspiegels kann mit Hilfe einer CCD-Kamera ein

vergrößertes Bild der Ebene des Eintrittsspalts auf einem Monitor beobachtet werden (nicht gezeigt).

Das Spektrometer besteht aus einer stickstoffgekühlten CCD-Kamera (Jobin Yvon, PCCD2048x512) und einem Doppelmonochromator mit einer Fokallänge von 2×1 m, dessen Gitter additiv angeordnet sind. Die hohe spektrale Auflösung des Spektrometers von $70 \mu\text{eV}$ im untersuchten Energieintervall (siehe Kapitel 4.5) hat zur Folge, dass bei jeder Aufnahme eines Spektrums mit der CCD-Kamera nur ein kleines Wellenlängenfenster (ca. 10 nm) untersucht werden kann.

Aufgrund der Positioniergenauigkeit und der Ortsauflösung dieses Aufbaus sind Raster-schrittweiten bis hinab zu 100 nm sinnvoll. Die in den folgenden Kapiteln vorgestellten Messungen basieren auf zweidimensionalen Flächenrasterungen. Geringe Verkip-pungen der Probe konnten durch eine passende Orientierung der zweidimensionalen Rasterebene im Raum ausgeglichen werden. Ein Rechner sorgt für die Synchronisierung der einzelnen Prozesse und erlaubt nach Einstellung der Parameter eine automatische Messdatenaufnahme. Details zur verwendeten Software sind in Abschnitt 4.6 zu finden.

Die Messanordnung kombiniert die hohe räumliche Auflösung des konfokalen Mikro-skops mit der hohen spektralen Auflösung des Spektrometers. Es können sowohl die Ab-hängigkeiten von Anregungswellenlänge und -leistung untersucht als auch temperatur- und polarisationsabhängige Messungen durchgeführt werden. Als Nachteile sind die Kosten und die erforderliche Justierarbeit zu nennen. Im Vergleich mit einem optischen Nahfeldmikroskop ist die mit diesem Mikro-Photolumineszenz-Aufbau erzielbare räum-liche Auflösung zwar etwas schlechter, jedoch sind höhere Intensitäten und schnellere Untersuchungen möglich, bei denen sich zudem die Polarisations-eigenschaften leichter bestimmen lassen. Mit der beschriebenen Anordnung wurden in dieser Arbeit die Photonen-Energien E_{PL} von Quantenfilm und Quantendraht detektiert und daraus die Einschlussenergie E_c direkt aus dem Experiment ermittelt. In dieser Differenz-energie sind neben dem Unterschied in den quantenmechanischen Eigenenergien auch die mit der Dimension variierenden Exziton-Bindungsenergien enthalten (vergleiche Kapitel 2.4). Da die Mikro-Photolumineszenz-Experimente bei tiefen Temperaturen (≈ 5 K) durchgeführt wurden, spielen exzitonische Effekte eine wichtige Rolle.

Der vorgestellte experimentelle Messplatz wurde vor Beginn der Versuchsdurchführung komplett neu aufgebaut. Dies beinhaltete die Beschaffung und Inbetriebnahme we-sentlicher Komponenten sowie die Aufrüstung bereits vorhandener Geräte. Beispiele hierfür sind das neue Lasersystem und die Ausstattung des Spektrometers mit einer CCD-Kamera.

4.5 Räumliche und spektrale Auflösung

Im vorherigen Abschnitt wurden bereits die Fokusgröße von 800 nm auf der Probenoberfläche und die spektrale Auflösung von $70 \mu\text{eV}$ erwähnt. Da diese Werte entscheidende Merkmale für die Mikro-Photolumineszenz-Spektroskopie sind, folgt hier eine genauere Diskussion der Orts- und Energieauflösung, wobei auch kurz auf die mechanische Stabilität eingegangen wird.

Abbildung 33 zeigt die Verteilung der PL-Intensität beim Abrastern einer punktförmigen Quelle. Es handelt sich hierbei um das Signal eines Quantendrahts (Details zur Probenstruktur sind in Abschnitt 7.1 unter „QWR1 Probe A“ zu finden). Da der Drahtquerschnitt nominell $8 \times 7 \text{ nm}^2$ beträgt und die im Konturdiagramm dargestellte Fläche senkrecht zur Drahtachse liegt, kann man in guter Näherung von einer Punktquelle ausgehen. Der schwarze Kreis kennzeichnet in der Abbildung den Abfall des Signals auf den halben Maximalwert. Entsprechend dem Durchmesser kann die räumliche Auflösung nach dem Kriterium der vollen Halbwertsbreite (FWHM, engl.: full width at half maximum) mit etwa 800 nm angegeben werden.

Wenn man nun den experimentell ermittelten Wert mit den theoretischen Erwartungen nach Gleichung (47) vergleicht, muss berücksichtigt werden, dass die angegebene Formel für die Auflösung R den Abfall auf $1/e^2$ des Maximalwerts beschreibt. Die theoretische FWHM-Auflösung R_{FWHM} ergibt sich bei einem gaußförmigen Querschnitt durch Multiplikation von R mit dem Faktor 0,59. Bei einer Wellenlänge von 800 nm und ei-

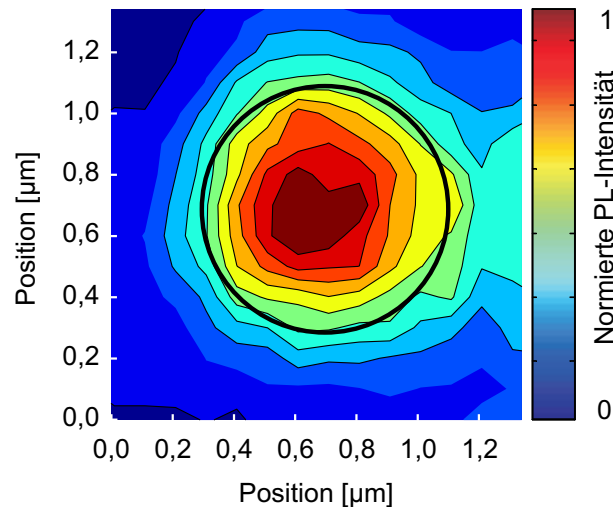


Abbildung 33: Räumliche Auflösung beim Abrastern einer punktförmigen Quelle. Der eingezeichnete Kreis entspricht einem Durchmesser von 800 nm.

ner Numerischen Apertur des Objektivs von 0,8 erhält man $R_{\text{FWHM}} = 378 \text{ nm}$. Der experimentelle Wert beträgt also etwas mehr als das Doppelte des erwarteten.

Ein Literaturvergleich zeigt, dass bei Mikro-Photolumineszenz-Experimenten oft keine Aussagen hinsichtlich der Fokusgröße gemacht werden oder nicht ersichtlich ist, ob es sich bei dem angegebenen Wert um die FWHM-Linienbreite handelt. In den Arbeiten von Nikolaus Gmeinwieser [Gme02] und Gert Schedelbeck [Sch98] sind die experimentellen Werte bezüglich der dort verwendeten Objektive und Wellenlängen ebenfalls etwa doppelt so groß wie die theoretischen. Dies ist auch in Referenz [Weg98] der Fall, in der von einem „beinahe beugungsbegrenzten Detektionsbereich“ gesprochen wird. Näher am theoretischen Grenzwert liegt die Fokusgröße bei Experimenten von Yoshita *et al.* [Yos98]. Dort wird jedoch ein Objektiv verwendet, das die Aberrationen ausgleichen kann, die durch das Kryostatfenster verursacht werden.

Der Einfluss des Kryostatfensters im oben beschriebenen Strahlengang kann durch die Ermittlung des Strahlprofils des Lasers untersucht werden. Dazu wird der Kryostat aus dem Aufbau entfernt und eine Photodiode mit aufliegender Maske in die Fokusebene des Objektivs gebracht. Dies ist schematisch in Abbildung 34 dargestellt. Die verwendete Maske für optische Lithographie zeichnet sich durch einen scharfen Übergang vom transparenten zum undurchlässigen Bereich aus.

Wird nun mit Hilfe des Piezoverschiebetisches der Fokus senkrecht zur Kante verschoben, so registriert die Photodiode für den dargestellten Fall eine Zunahme des integralen Signals. Die entsprechenden Datenpunkte sind in Abbildung 35(a) dargestellt. Durch Ableitung des Signals nach dem Ort erhält man das in Teilbild (b) aufgetragene Strahl-

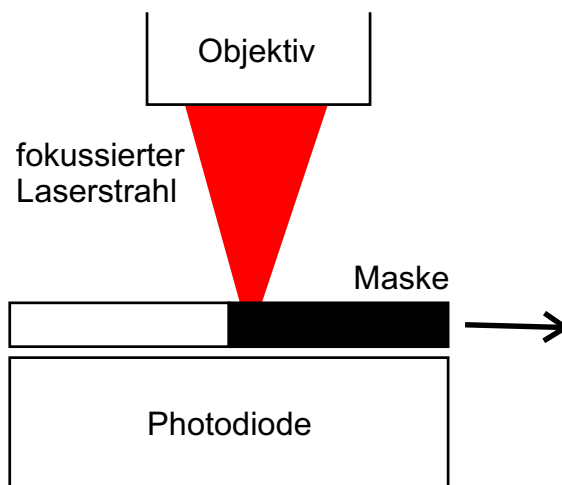


Abbildung 34: Prinzip des Rasterns über eine Kante zur Bestimmung des Strahlprofils.

profil des Lasers mit einer FWHM-Linienbreite von etwa 680 nm. Diese liegt nur noch um den Faktor 1,8 oberhalb der theoretischen Grenze.

Die verbleibende Diskrepanz kann nur noch durch Fehler erklärt werden, die nicht ideale optische Komponenten induzieren. Nimmt man an, dass in der bereits erwähnten Referenz [Yos98] der (für das korrigierte Objektiv) angegebene Strahldurchmesser sich auf den $1/e^2$ -Abfall bezieht, so unterscheiden sich Experiment und Theorie um den Faktor 1,7. Somit ist die gemessene räumliche Auflösung von rund 800 nm in Einklang mit den Literaturangaben entsprechender Mikro-Photolumineszenz-Aufbauten.

Um die mit hoher Auflösung aufgenommenen Spektren exakt den einzelnen Probenorten zuordnen zu können, ist es notwendig, die Anordnung über die Messdauer hinweg mechanisch stabil zu halten. Zum einen konnte durch die in den folgenden Kapiteln gezeigten Rasterungen empirisch nachgewiesen werden, dass dies möglich ist. Zum anderen wurden bereits vor Beginn der Photolumineszenz-Experimente Langzeitstabilitätstests durchgeführt. Diese Messungen basieren wiederum auf dem in Abbildung 34 skizzierten Prinzip. Dabei wird der Laserfokus anfangs halb durch die Maske abgeschattet, d. h. er befindet sich an der Position, die in Abbildung 35(a) gerade der Mitte zwischen Minimal- und Maximalintensität entspricht. So kann beispielsweise mit Hilfe eines XY-Schreibers die zeitliche Veränderung des Fokusorts aufgrund der Einflüsse der Umgebung beobachtet werden.

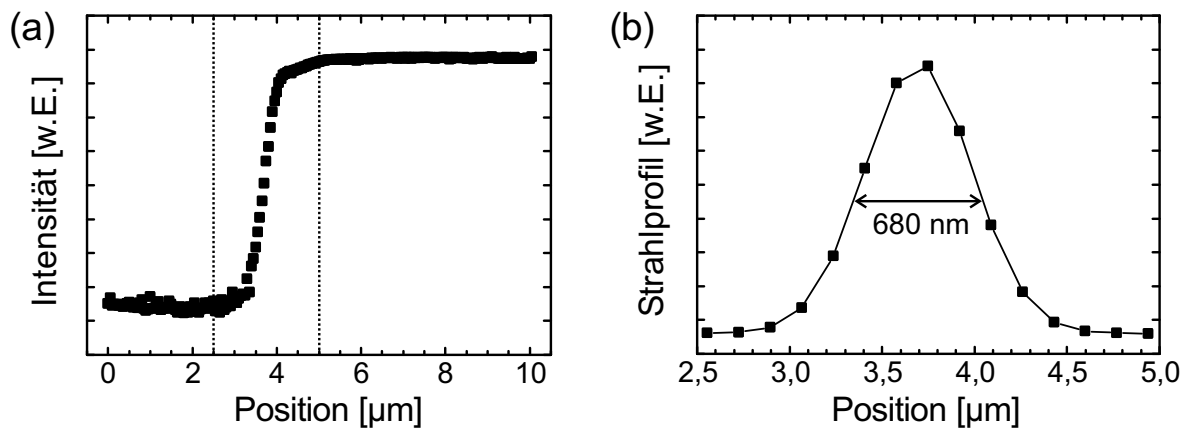


Abbildung 35: (a) Von der Photodiode registriertes integrales Signal in willkürlichen Einheiten (w.E.), das beim Rastern über eine Kante aufgenommen wurde. (b) Das Strahlprofil des Lasers ergibt sich (für den markierten Energiebereich) aus der Ableitung der in (a) gezeigten Daten nach dem Ort und kann zur Bestimmung der räumlichen Auflösung genutzt werden. Die Linien dienen der Orientierung.

Es zeigte sich hierbei, dass – abgesehen von der bereits erwähnten Schwankungsbreite in der Positioniergenauigkeit von ± 40 nm – der Fokus häufig über Stunden eine stabile Position einnahm. Demzufolge erfüllt die mechanische Stabilität die Anforderungen, da die typischen Zeiten für große Rasterflächen im Bereich von einer Stunde liegen.

Ein wichtiges Merkmal der Mikro-Photolumineszenz-Spektroskopie ist neben der räumlichen auch die spektrale Auflösung. Man kann sie durch die Aufnahme des Spektrums einer Quecksilber-Argon-Dampf Lampe (Mikropack, CAL-2000-EXT) bestimmen, da die Breiten der diskreten Spektrallinien gegenüber dem Auflösungsvermögen des Messaufbaus klein sind. Zur Überprüfung wurde die Argon-Linie bei 1623,9 meV (entsprechend 763,51 nm) gewählt, die nahe dem in dieser Arbeit betrachteten Wellenlängenbereich liegt.

Wie in Abbildung 36 dargestellt ist, beträgt die FWHM-Linienbreite im untersuchten Energieintervall rund $70 \mu\text{eV}$. Diesen Wert, der durch eine firmenseitige Feinjustierung des Spektrometers noch näher an die theoretische Grenze von $40 \mu\text{eV}$ gebracht werden kann, bestätigen auch die in Kapitel 5.2 vorgestellten Resultate. Dort zeigen sich scharfe Spitzen in den Photolumineszenz-Spektren, die von natürlichen Quantenpunkten herühren und die gut aufgelöst werden können (siehe Abbildung 41).

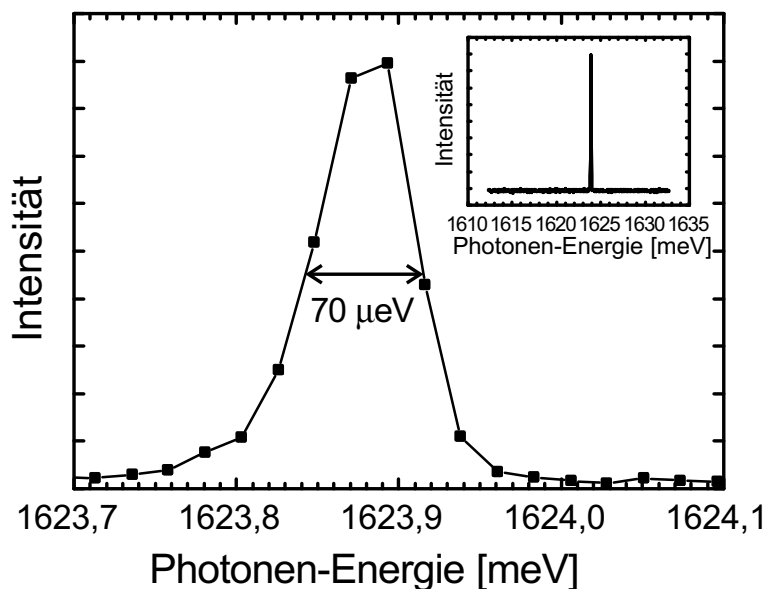


Abbildung 36: *Bestimmung der spektralen Auflösung mit Hilfe einer Quecksilber-Argon-Dampf Lampe. Die Linien dienen der Orientierung. Das eingesetzte Bild zeigt die untersuchte Spektrallinie im gesamten (mit einer CCD-Aufnahme detektierten) Energiebereich.*

Allgemein sind in der vorliegenden Arbeit bei den Spektren, die mit der CCD-Kamera aufgenommen wurden, die Intensitäten in willkürlichen Einheiten angegeben. Dies gilt ebenso für die in Abschnitt 6.3 gezeigten Röntgenspektren. Beginnend mit Abbildung 36 wird in den Graphen die Bezeichnung „Intensität“ ohne den Zusatz „[w.E.]“ verwendet.

4.6 Softwareroutinen

Die für Mikro-Photolumineszenz-Rasterungen notwendige Synchronisierung von Probenpositionierung und Spektrenaufnahme übernimmt – wie bereits erwähnt – ein Rechner. Da die zur CCD-Kamera gehörige kommerzielle Software entgegen den firmenseitigen Angaben keine ausreichende Integration externer Programme zuließ, musste eine eigene Anwendung entwickelt werden, auf die in diesem Kapitel kurz eingegangen wird.

Um Messungen zu ermöglichen, waren separate Ansteuerungen für Piezoverschiebetisch, Doppelmonochromator und CCD-Kamera nötig, die in getrennten Einheiten inklusive zugehöriger graphischer Benutzeroberflächen mit Hilfe der Sprache Delphi programmiert wurden. Nach Fertigstellung erster Programmteile führte Nikolaus Gmeinwieser diese Arbeit in einer Weise weiter, die es erlaubt, auch andere Hardwarekomponenten in die Software zu integrieren [Gme02].

Die Synchronisierung übernimmt ein zentraler Programmteil, in dem auch die gewünschten Rastergebiete festgelegt werden können. Beispielsweise wird überwacht, dass vor der Aufnahme eines Spektrums der Piezoverschiebetisch die Sollposition erreicht hat. Während einer Rasterung, bei der ein stets aktuelles Konturdiagramm schon erste Erkenntnisse über die Messung liefert, werden die Daten automatisch wahlweise im Text- oder Binärformat gespeichert. Alle Mikro-Photolumineszenz-Rasterungen erfolgen entlang zweier zueinander senkrechter Richtungen x und y , die nicht notwendigerweise mit den X- und Y-Achsen des Verschiebetischs übereinstimmen müssen. In einem Datensatz $I_{\text{PL}}(E_{\text{PL}}, x, y)$ ist demnach die PL-Intensität I_{PL} als Funktion der detektierten Photonen-Energien E_{PL} und der Positionen (x, y) auf der Probe gespeichert.

Da die große Datenmenge rasch analysiert werden muss, war die Programmierung einer geeigneten Auswertesoftware unter der graphischen LabVIEW-Umgebung ein Bestandteil der Diplomarbeit von Harald Hajak [Haj03]. Abbildung 37 stellt die zugehörige Benutzeroberfläche dar. Nach dem Einlesen des Datensatzes im Feld (1) wird im Bild-

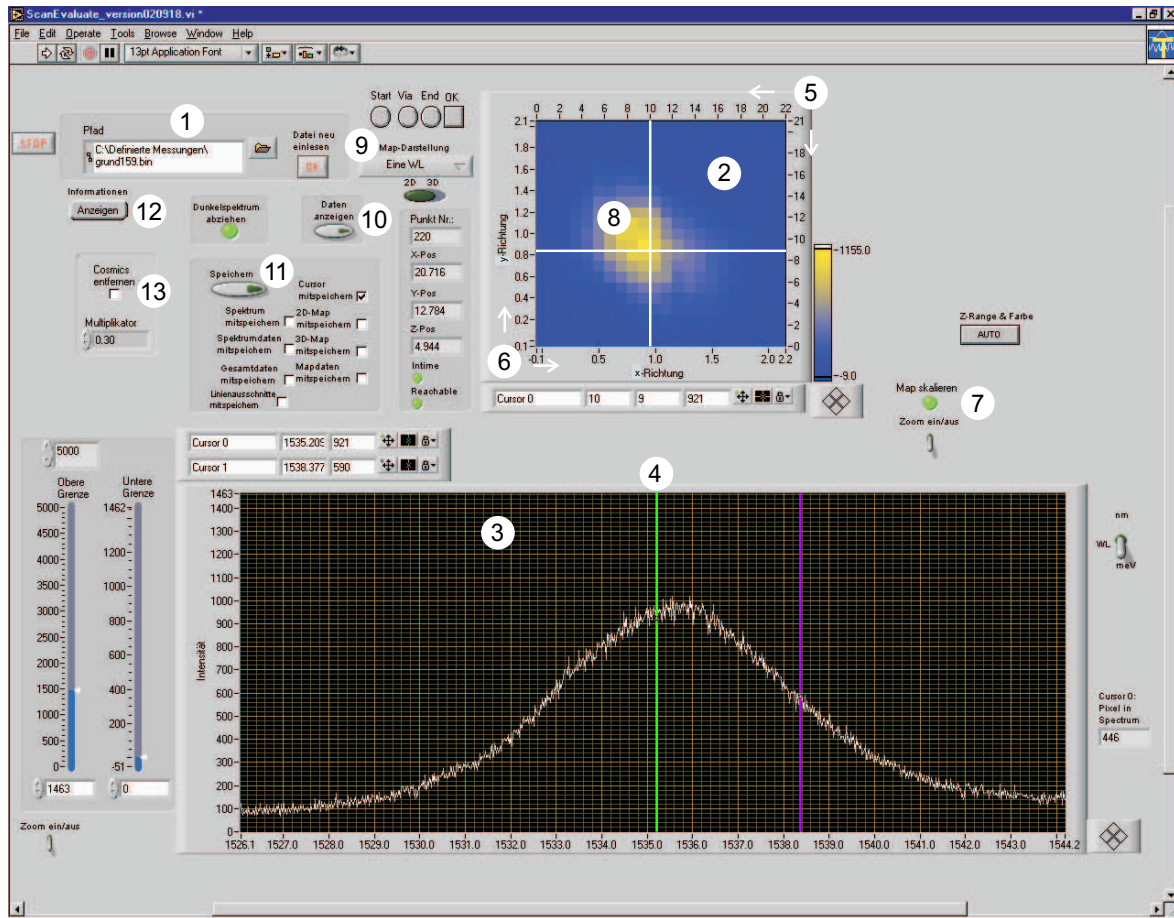


Abbildung 37: Benutzeroberfläche der Auswertesoftware für Mikro-Photolumineszenz-Aufnahmen.

bereich (2) die PL-Intensität $I_{\text{PL}}(x, y) |_E$ farbkodiert für diejenige Energie E angezeigt, die im Spektrumfenster (3) mit der Marke (4) interaktiv ausgewählt wurde.

Die Koordinatenachsen im Bildbereich geben die Richtungen x und y der Rasterung wieder, wobei sowohl die Punktkoordinaten (5) als auch die tatsächlichen Entfernungen in Mikrometern (6) aufgetragen sind. Mit Hilfe der Schaltfläche (7) kann der Bildbereich quadratisch oder proportional zur Rasterfläche eingestellt werden. Das Fadenkreuz (8) ermöglicht die Auswahl eines Rasterpunkts, dessen Spektrum sofort im Fenster unten zu sehen ist. Neben der Darstellung der farbkodierten Intensitäten zu einer festen Energie, kann man mit dem Auswahlfeld (9) unter anderem auch einen Energiebereich selektieren.

Weitere Schaltflächen erlauben einen Zugriff auf den Datensatz (10), ermöglichen die Speicherung in Formaten, die sich mit anderen Programmen gut weiterverarbeiten las-

sen (11) und dienen zur Anzeige der Kommentardatei, in der man zum Beispiel Mess- und Probenparameter festhalten kann (12). Schließlich bewirkt die Option (13) beim Einlesen die automatische Entfernung derjenigen Datenpunkte, die durch kosmische Strahlung hervorgerufen wurden.

4.7 Zusammenfassung

Eindimensionale Quantendrahtstrukturen können mit Molekularstrahlepitaxie durch Überwachsen von Spaltflächen hergestellt werden. Dieses Verfahren nutzt aus, dass man GaAs, AlAs und InAs in der Ebene senkrecht zur [011]-Richtung über makroskopische Distanzen atomar glatt spalten kann. Photolumineszenz-Messungen bieten sich an, um die Eigenschaften derartiger Quantendrähte zu studieren. Dabei müssen in diesen Quantenstrukturen Auswahlregeln beachtet werden, die sich ausgehend von Fermis Goldener Regel herleiten lassen. Aufgrund von Grenzflächenrauigkeiten können die Linien der Übergänge inhomogen verbreitert sein, wobei überlagerte scharfe Spitzen in den Spektren auf natürliche Quantenpunkte hinweisen.

Für die optischen Untersuchungen der niedrigdimensionalen Halbleitersysteme wurde ein Mikro-Photolumineszenz-Messplatz mit eigenen Programmen zur Geräteansteuerung und Auswertung realisiert. Der Aufbau ist mechanisch sehr stabil und zeichnet sich durch eine hohe Ortsauflösung von 800 nm und eine hohe spektrale Auflösung von $70 \mu\text{eV}$ aus. Damit wurden die Voraussetzungen für den Nachweis einzelner Quantendrähte und die Bestimmung der Einschlussenergien geschaffen.

5 Unverspannte Einfach-Quantendrahtstruktur

Um die Leistungsfähigkeit des im vorangehenden Kapitel vorgestellten Versuchsaufbaus für Experimente an einzelnen verspannungsinduzierten Quantendrähten zu bestimmen, wurde zunächst eine bereits von Gert Schedelbeck [Sch98] untersuchte Probe vermessen. Für diese unverspannte Einfach-Quantendrahtstruktur konnte ergänzend noch die Polarisations-, Temperatur- und Leistungsabhängigkeit bestimmt werden. Die gewonnenen Resultate dienen in den folgenden Kapiteln als Referenz für die Eigenschaften verspannter Quantensysteme.

5.1 Probenaufbau

Die in Abbildung 38 gezeigte Struktur (Identifikationsnummer 12.05.97.1Ta3_4) enthält eine $4 \times 4 \text{ nm}^2$ große T-förmige GaAs-Kreuzung, deren Herstellung auf dem CEO-Verfahren basiert. Im ersten Wachstumsschritt wurde hierzu entlang der $[100]$ -Richtung nach einer 500 nm breiten GaAs-Pufferschicht ein 900 nm dickes Übergitter aus abwechselnd 2 nm GaAs und 8 nm $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ gewachsen, das als Referenzbarriere

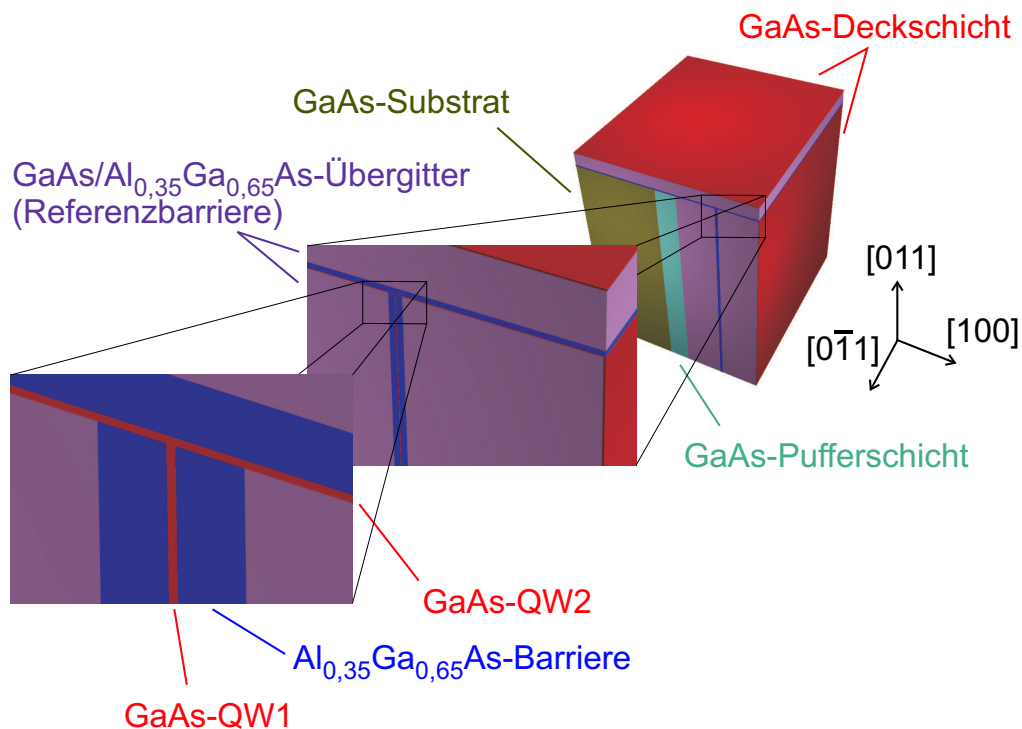


Abbildung 38: Schematische Darstellung der untersuchten unverspannten Einfach-Quantendrahtstruktur. Die Vergrößerung zeigt die Kreuzung der GaAs-Quantenfilme.

dient. Der Einfach-Quantenfilm (QW1, engl.: quantum well) mit der Breite $d_{100} = 4$ nm ist zwischen zwei $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barrieren mit je 30 nm Dicke eingebettet. Nach dem Aufbringen einer weiteren 900 nm dicken GaAs/ $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Referenzbarriere (Übergitterzusammensetzung wie oben) verhindert eine GaAs-Deckschicht der Breite 10 nm eine rasche Oxidation des Aluminiums.

Nach Durchführung der in Abschnitt 4.1 beschriebenen Vorbereitungsschritte wurde im zweiten Wachstumsvorgang entlang der $[011]$ -Richtung (vergleiche Abbildung 38) unmittelbar nach dem Freilegen der Spaltfläche ein GaAs-Quantenfilm (QW2) der Breite $d_{011} = 4$ nm gewachsen. Auf diesen folgen eine $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barriere und danach ein GaAs/ $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Übergitter (Zusammensetzung wie oben) mit den Dicken 30 nm und 300 nm, ehe eine 10 nm breite GaAs-Deckschicht die Struktur abschließt.

Der wesentliche Bereich der Probe ist erneut in Abbildung 39 zu sehen. Die hier klar zu erkennende T-förmige Struktur des unverspannten Quantendrahts (uQWR, engl.: unstrained quantum wire) wiederholt sich im Prinzip an den Stellen in $[100]$ - und $[\bar{1}00]$ -Richtung, an denen sich eine 2 nm breite GaAs-Lage des Übergitters befindet. Aufgrund der geringen Dicke dieses Quantenfilms liegt die Energie des Grundzustands jedoch so hoch, dass die Übergitterbereiche des ersten Wachstumsschritts als quasi-homogene Barrieren angesehen werden können. Die Verwendung eines Übergitters ist zum einen durch die Entwicklungsgeschichte derartiger Proben bedingt und fördert zum anderen die kristalline Qualität verglichen mit dicken Lagen aus reinem $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$.

Insgesamt stellt die Struktur eine Realisierung des in Kapitel 2.3 simulierten Quantendrahtsystems dar. Nach den dortigen Überlegungen bildet sich am Kreuzungspunkt von QW1 und QW2 ein unverspannter Quantendraht. Der folgende Abschnitt widmet sich dem Nachweis dieser eindimensionalen Struktur und der Bestimmung der zugehörigen Einschlussenergie.

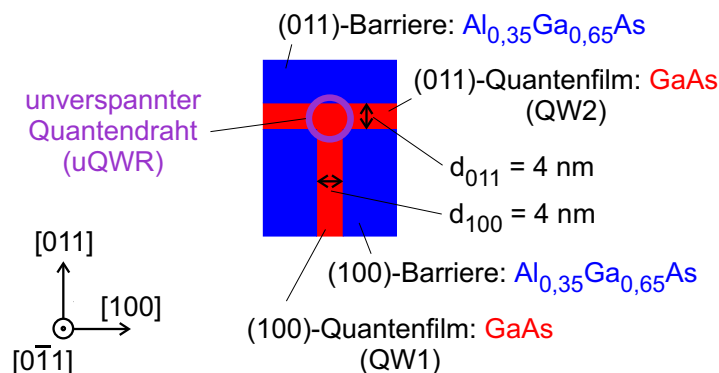


Abbildung 39: Probenparameter des untersuchten unverspannten Quantendrahts.

5.2 Identifikation der Photolumineszenz-Signale

Vor den Photolumineszenz-Untersuchungen wurde die Probe *ex situ* gespalten und eine (0 $\bar{1}1$)-Fläche freigelegt, die eine örtliche Trennung der PL-Emission der einzelnen Quantenstrukturen ermöglicht. In Abbildung 40 ist schematisch der $2,4 \times 2,2 \mu\text{m}^2$ große Bereich eingezeichnet, der mit Hilfe des Mikro-Photolumineszenz-Aufbaus abgerastert wurde, um so durch die Kombination von räumlicher (der Kreis in der Skizze symbolisiert den Anregungs-/Detektionsfokus) und spektraler Auflösung den T-förmigen unverspannten Quantendraht zu identifizieren.

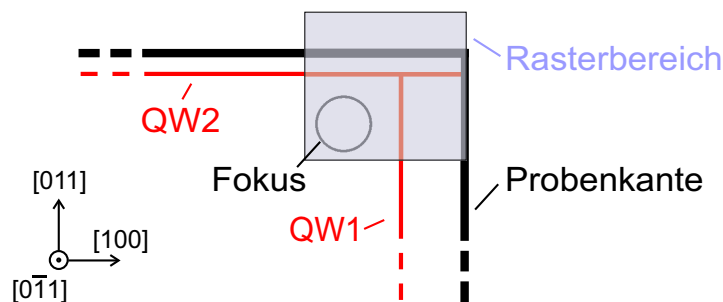


Abbildung 40: Schema des abgerasterten Bereichs und des Anregungs-/Detektionsfokus.

Abbildung 41 fasst die Ergebnisse dieser Messungen zusammen, die bei einer Temperatur von $T = 7,0 \text{ K}$ durchgeführt wurden. Die gewählten Anregungsenergien E_{exc} des Lasers betrugen 1682,6 und 1671,0 meV. Bei einer Leistung von $P = 1,0 \mu\text{W}$ entspricht dies einem Photonen-Fluss von $3,7 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ im Bereich der Fokusfläche, die einen Durchmesser von rund 800 nm besitzt. Bei den Messungen wurden die Stellungen der Polarisationsdreher PD1 und PD2 für das jeweilige Signal optimiert. Die entsprechenden Polarisationsrichtungen sowie die Integrationszeit I sind zusammen mit den weiteren Messparametern wie bei allen folgenden Spektren in der Bildunterschrift zu finden. Dabei bedeutet die Angabe „PD1 = [011]“, dass die Polarisation des einfallenden Laserlichts parallel zu QW1 lag.

In der linken Spalte von Abbildung 41 kann man den Rasterbereich sehen, wobei die Pixelgröße der gewählten Schrittweite von je 100 nm in [100]- und [011]-Richtung entspricht. Zu jedem Pixel gehört ein komplettes Photolumineszenz-Spektrum, wobei die PL-Intensität I_{PL} farbkodiert nur für eine ausgewählte Photonen-Energie E_{PL} aufgetragen ist. Der Zahlenwert von E_{PL} steht im Rasterbereich und ist in den Spektren auf der rechten Seite mit einem Pfeil gekennzeichnet. Umgekehrt geben links die weißen Kreisscheiben die Positionen (das zugehörige Pixel befindet sich rechts oberhalb der Markierung) wieder, an denen die Spektrenaufnahme erfolgte. Alle Rasterungen wurden unmittelbar hintereinander durchgeführt, um Driftphänomene auszuschließen.

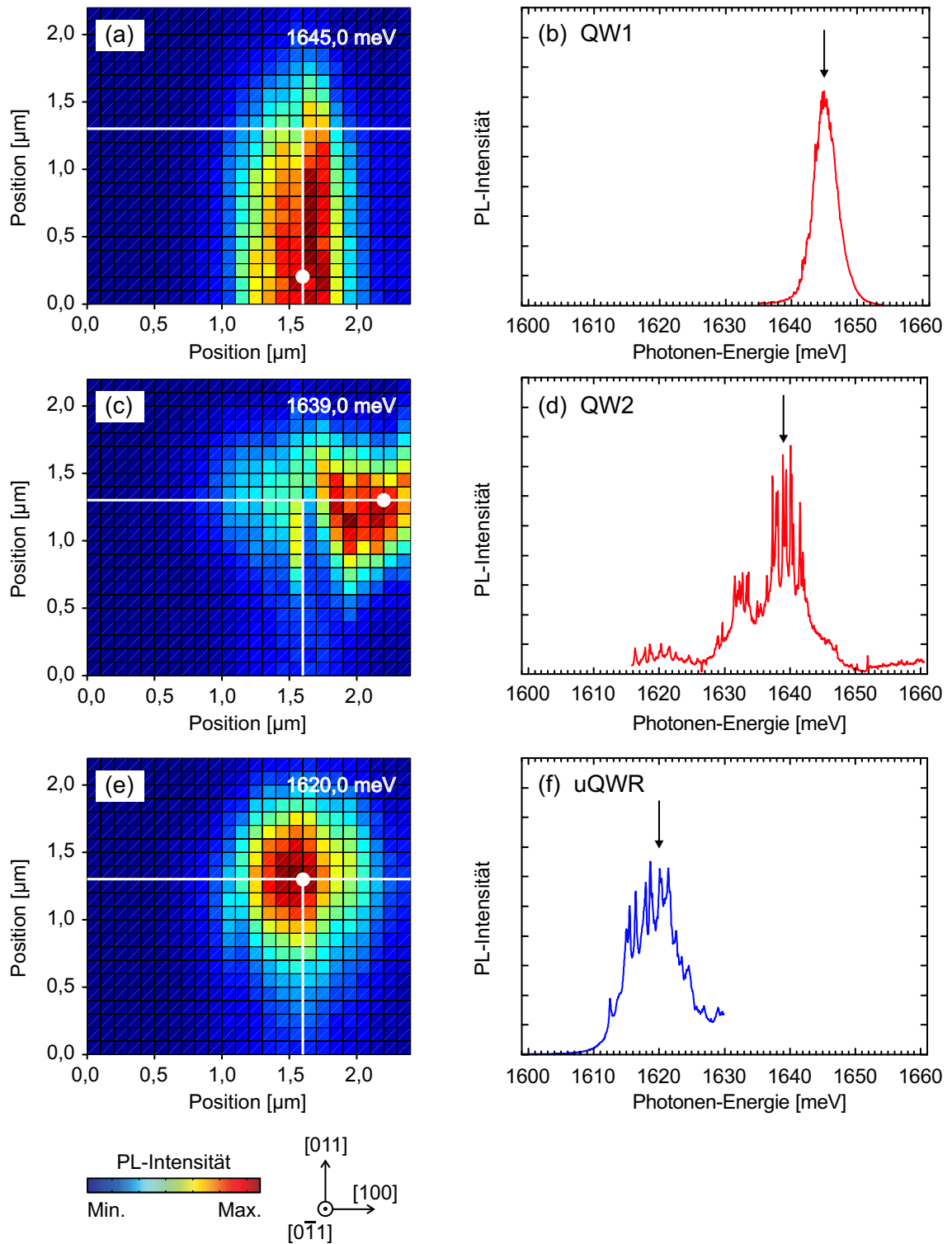


Abbildung 41: Identifikation des Quantendrahts durch Vergleich der auf der linken Seite gezeigten Intensitätsverteilungen für die angegebenen, in der rechten Spalte mit einem Pfeil markierten Energien. Die weißen Kreisscheiben kennzeichnen die Probenorte, an denen die gezeigten Spektren mit folgenden Parametern aufgenommen wurden: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 10/16/40 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1682,6/1671,0/1671,0 \text{ meV}$, $PD1 = PD2 = [011]/[100]/[011]$; $T = 7,0 \text{ K}$.

Teilbild (a) zeigt die Intensitätsverteilung des Signals, das zum QW1 gehört. Die Zuordnung ergibt sich dabei geometrisch, da aufgrund der genau bekannten Schichtdicken des Wachstums mit Molekularstrahlepitaxie klar ist, dass die räumliche Verteilung der Emission mit der Lage des QW1 korrespondiert. Die Quantenfilme QW1 und QW2 sind in der Abbildung durch weiße Linien markiert. Am oberen Bildrand kann man deutlich den Abfall der Intensität erkennen, wohingegen nach unten das PL-Signal bis zur Probenkante beobachtbar bleibt (nicht gezeigt). Im zugehörigen Spektrum (b) ist das QW1-Signal um 1645 meV zentriert und besitzt eine FWHM-Linienbreite von 4 meV.

Die Intensitätsverteilung des QW2-Signals ist in Teilbild (c) zu sehen. Sie liegt horizontal und hat nicht die gleiche Qualität wie die des QW1. Die Tatsache, dass links der T-förmigen Kreuzung die Intensität geringer ist als in dem Abschnitt des QW2, der näher am Probenrand liegt, wird durch das effektive Abfließen der Ladungsträger in das benachbarte Substrat erklärt.

Ein Blick auf das in Teilbild (d) dargestellte Spektrum verdeutlicht den grundlegenden Unterschied zum [100]-Wachstum, auf den auch die vergleichsweise schlechtere Verteilung in (c) zurückzuführen ist. Hier fallen die scharfen Spitzen auf, die dem Spektrum überlagert sind. Bereits in Abschnitt 4.3 wurde dargelegt, dass diese Signale der strahlenden Rekombination lokalisierter Exzitonen zugeordnet werden können. Die Exzitonen sind dabei in natürlichen Quantenpunkten gefangen, die – bedingt durch das schwerer beherrschbare [011]-Wachstum – durch Grenzflächenrauigkeiten entstehen. Entsprechend dieser Erklärung befinden sich die scharfen Spitzen in Abbildung 41(d) vorwiegend an der Niederenergieflanke, wobei das Zentrum des Spektrums bei 1639 meV liegt. Das Signal ist im Vergleich zum QW1 stark inhomogen verbreitert und zeigt ein Nebenmaximum bei 1632 meV. Der energetische Unterschied zum Hauptmaximum wird durch eine Dickendifferenz im QW2 von zwei GaAs-Monolagen erklärt. Die Tatsache, dass trotz identischer Quantenfilmbreiten das QW2-Signal gegenüber der QW1-Emission rotverschoben ist, lässt sich auf die größere Schwerlochmasse in [011]-Richtung zurückführen (vergleiche Tabelle 1 auf Seite 38).

In Teilbild (e) ist eine örtlich lokalisierte, nur durch die räumliche Auflösung limitierte, PL-Emission zu erkennen. Da sie genau am Schnittpunkt der beiden Quantenfilme ihre Maximalintensität besitzt, handelt es sich um das Signal des Quantendrahts. Die Zuordnung wird durch die Tatsache bestätigt, dass die Quantenfilmsignale an diesem Ort eine Abnahme der Intensität der strahlenden Rekombination zeigen. Das Minimum in der Quantenfilmmmission tritt auf, weil die Ladungsträger von dem energetisch tiefer liegenden Draht eingefangen werden (vergleiche [Gro94]), dessen spektrales Zentrum bei 1620 meV liegt.

Das Signal, das eine FWHM-Linienbreite von ca. 11 meV aufweist, zeigt wie der QW2 charakteristische Spitzen (in (f) abgebildet). Die zuvor für die Rauigkeiten eines Quantenfilms gegebenen Erklärungen gelten genauso für einen Draht. Hier ist aufgrund der reduzierten Dimension eine Lokalisierung sogar noch wahrscheinlicher. Dieser Übergang vom Quantendraht zum Quantenpunkt wurde von Hasen *et al.* mittels temperaturabhängiger Messungen genau untersucht [Has97].

Im Übersichtsspektrum in Abbildung 42 sind die bisherigen Ergebnisse zusammengefasst. Die drei PL-Signale wurden gemäß obiger Zuordnung beschriftet. Aus diesem Graphen lässt sich eine Einschlussenergie E_c von 19 meV ermitteln, wenn man den dominierenden Signalanteil des QW2 als die energetisch tiefstliegende Quantenfilmemission betrachtet. Berechnungen mit nextnano³ ergeben für diese Kreuzung zweier 4 nm breiter GaAs-Quantenfilme, die von einer $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barriere umgeben sind, ein E_c von 18 meV und stimmen somit gut mit dem Experiment überein.

Obwohl die angeregte Querschnittsfläche des Quantendrahts etwa 200-mal kleiner als die der Quantenfilme ist, weist das uQWR-Signal eine nur um den Faktor 4 reduzierte PL-Emission auf. Diese starke relative uQWR-Intensität unterstreicht die Wirksamkeit des Ladungsträgereinfangs aus den angrenzenden Quantenfilmen. Die Ergebnisse dieses Abschnitts reproduzieren die von Gert Schedelbeck [Sch98] aufgenommenen Daten und demonstrieren die Leistungsfähigkeit des Messplatzes.

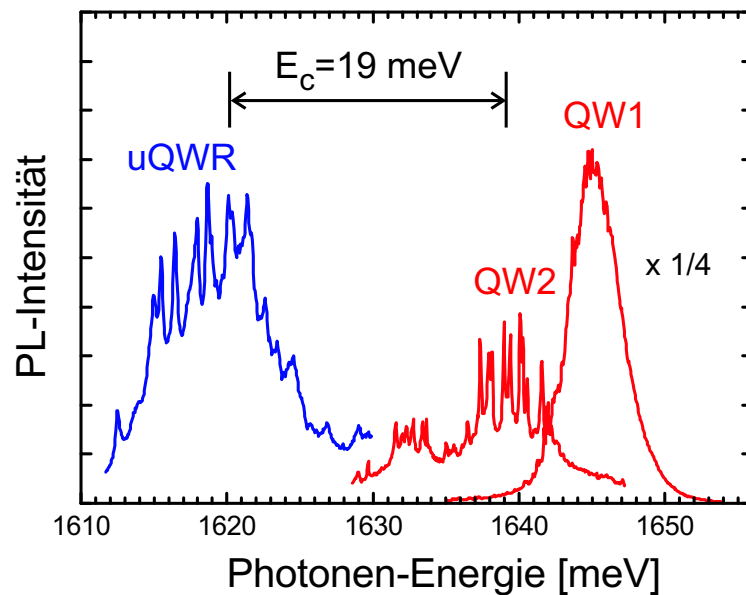


Abbildung 42: Die Zusammenfassung wiederholt die Spektren der Quantenfilme und des Quantendrahts. Die Einschlussenergie E_c lässt sich aus der Differenz der kleineren der beiden Übergangsenergien von QW1 und QW2 und der des uQWR bestimmen.

5.3 Polarisationsabhängige Messungen

Zusätzlich wurden an der Quantendrahtstruktur auch polarisationsabhängige Messungen durchgeführt. Sowohl beim unverspannten Quantendraht uQWR als auch bei den Quantenfilmen QW1 und QW2 hatte die Anregungspolarisation nur einen kleinen Einfluss auf die PL-Signalstärke. Für die Messungen wurden diejenigen Anregungskonfigurationen gewählt, mit denen sich jeweils die größten PL-Intensitäten erzielen ließen.

In Abbildung 43 ist das PL-Signal des QW1 für verschiedene Polarisationsrichtungen in der $(0\bar{1}1)$ -Ebene aufgetragen. Man kann erkennen, dass die detektierte Intensität deutlich zunimmt, je mehr die untersuchte Polarisation in die Richtung des Quantenfilms gedreht wird. Demnach weist das QW1-Signal wie erwartet eine starke $[011]$ -Polarisation auf, wobei das Verhältnis der maximalen Werte von $[011]$ - und $[100]$ -Signal etwa 40:1 beträgt.

Analog wurde das Polarisationsverhalten des QW2 untersucht. Die Spektren, die mit einer Anregungspolarisation in $[100]$ -Richtung aufgenommen wurden, sind in Abbil-

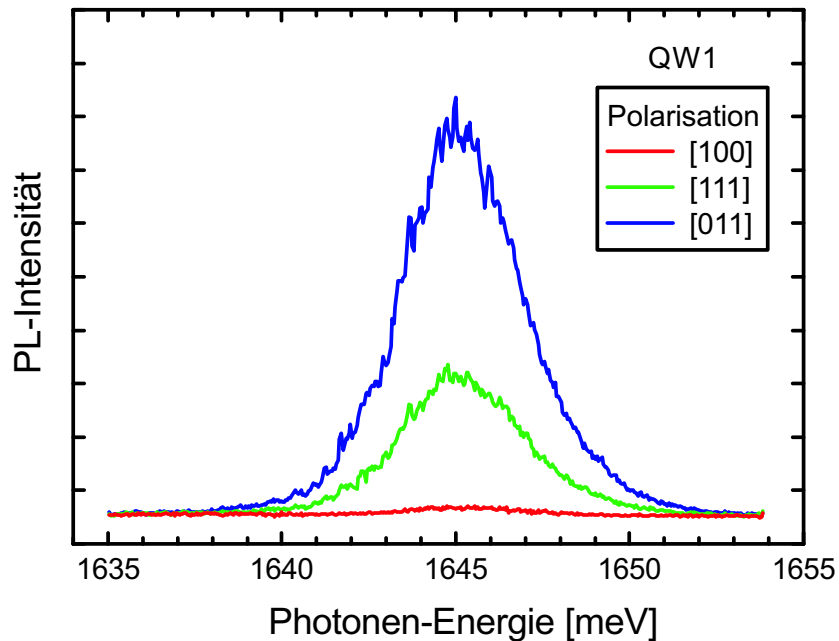


Abbildung 43: Detektierte PL-Intensität des QW1 in Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung. Wie erwartet liegt eine starke Polarisation in $[011]$ -Richtung (Schnitt des QW1 mit der Probenoberfläche) vor. Die Spektren wurden ca. $1\,\mu\text{m}$ von der T-Kreuzung entfernt mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0\,\mu\text{W}$; $I = 2\,\text{s}$; $E_{\text{exc}} = 1682,6\,\text{meV}$; $PD1 = [011]$; $T = 7,0\,\text{K}$.

dung 44 zusammengestellt. Im Gegensatz zum Quantenfilm QW1 wird hier das stärkste Signal für diejenige Stellung des Polarisationsdrehers PD2 detektiert, die der [100]-Richtung entspricht, also der Richtung, die durch den Schnitt des QW2 mit der Probenoberfläche gegeben ist. Bei einer Drehung hin zum senkrecht zur [100]-Richtung liegenden QW1 verringert sich wie erwartet das detektierte PL-Signal.

Das gemessene Verhältnis der Maximalintensitäten von [100]- und [011]-Polarisation beträgt etwa 12:1, ist also kleiner als für den QW1. Dies korrespondiert mit der Tatsache, dass für (011)-Quantenfilme das Übergangsmatrixelement zwischen Elektron und Schwerloch nicht exakt null ist [Ada94]. Zusätzlich bestätigt ein Blick auf Abbildung 44 das Vorliegen natürlicher Quantenpunkte, da sich die energetische Lage der scharfen Spitzen nicht ändert.

Nachdem gezeigt wurde, dass beide Quantenfilme die erwartete Polarisation entlang der jeweiligen Schnitte mit der Probenoberfläche aufweisen, wird jetzt das Verhalten des Quantendrahtsignals untersucht. Die Polarisation des anregenden Lasers lag dabei in [011]-Richtung. Die Ergebnisse dieser Messungen sind in Abbildung 45 zusammen-

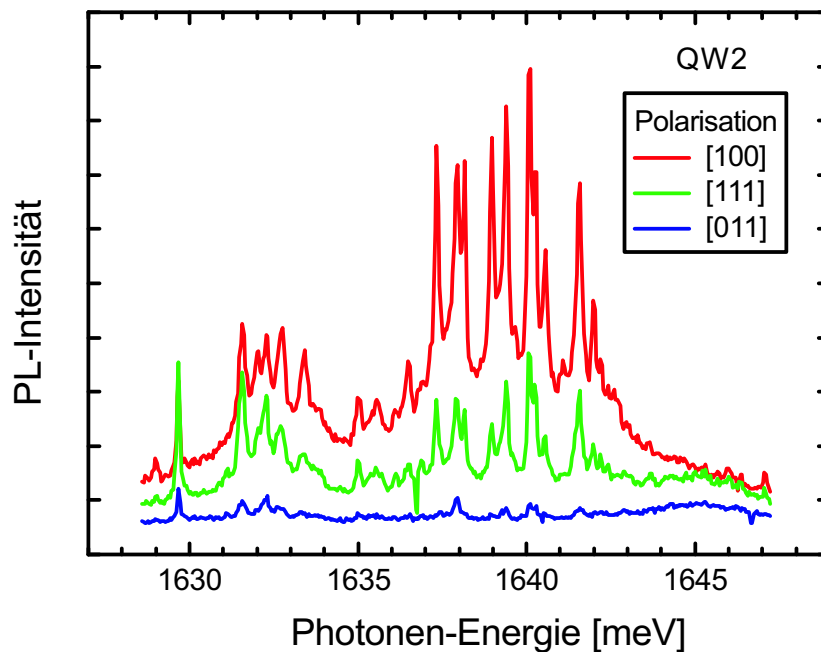


Abbildung 44: Detektierte PL-Intensität des QW2 in Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung. Wie erwartet liegt hier eine Polarisation in [100]-Richtung (Schnitt des QW2 mit der Probenoberfläche) vor. Die Spektren wurden ca. $0,6\,\mu\text{m}$ rechts von der T-Kreuzung mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0\,\mu\text{W}$; $I = 8\,\text{s}$; $E_{\text{exc}} = 1671,0\,\text{meV}$; $\text{PD1} = [100]$; $T = 7,0\,\text{K}$.

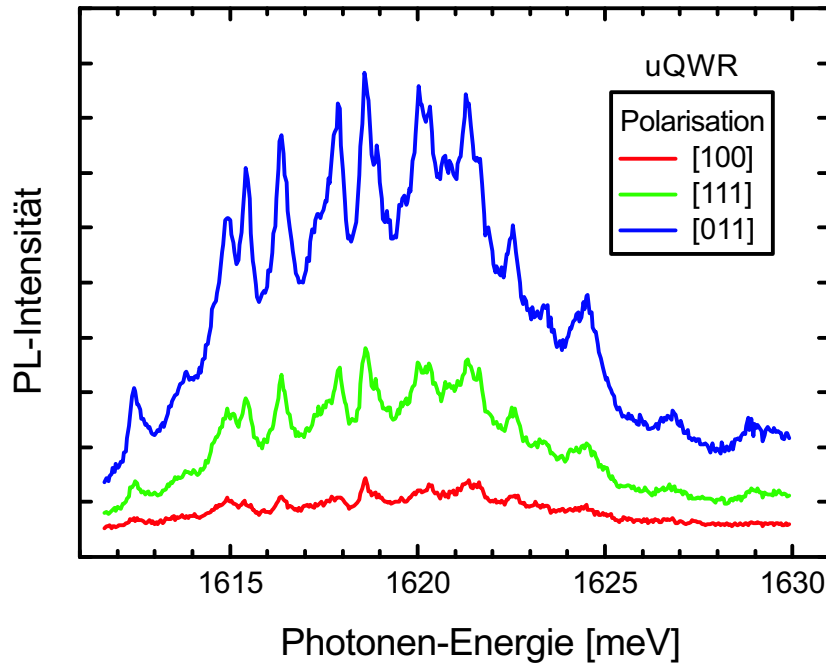


Abbildung 45: Detektierte PL-Intensität des uQWR in Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung. Wie beim Quantenfilm QW1 wird die [011]-Polarisation bevorzugt. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu W$; $I = 8 s$; $E_{exc} = 1671,0 meV$; $PD1 = [011]$; $T = 7,0 K$.

gefasst. Deutlich ist die Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung zu erkennen, wobei sich ein Verhältnis von 10:1 zwischen den maximalen Intensitäten von [011]- und [100]-Signal ergibt. Die bevorzugte Polarisationsrichtung des uQWR entspricht der des QW1, jedoch ist die dazu senkrechte Komponente nicht vollständig unterdrückt.

Aufgrund der komplizierten Valenzbandstruktur ist eine detaillierte Diskussion der Polarisationsverhältnisse schwierig und wird hier nicht weiter verfolgt. Die in diesem Abschnitt präsentierten Ergebnisse dienen jedoch als Referenz bei der Identifikation verspannungsinduzierter Quantendrähte in Kapitel 7.

5.4 Temperaturabhängige Messungen

In dieser Arbeit war die Erhöhung der Einschlussenergie ein zentrales Ziel, das für die Realisierung von Raumtemperatur-Anwendungen unentbehrlich ist. Deswegen muss der Versuchsaufbau neben polarisationsabhängigen Messungen auch die Durchführung temperaturabhängiger Untersuchungen ermöglichen. Solange die thermische Energie die Einschlussenergie nicht wesentlich übersteigt, sollte der eindimensionale uQWR mit

Exzitonen bevölkert sein. Derartige Experimente erfordern mehr Aufwand als die bisher diskutierten, da sich der aus Kupfer gefertigte Probenhalter bei jeder Temperaturänderung ausdehnt bzw. zusammenzieht und so ein erneutes Auffinden und Definieren des gewünschten Rasterbereichs nötig macht.

Abbildung 46(a) zeigt die PL-Signale des QW1 für verschiedene Temperaturen im Bereich von 5,6 bis 100 K. Wie in der gesamten Arbeit wurden die Spektren bezüglich der Integrationszeit normiert. Auf die Tatsache, dass mit zunehmender Temperatur glattere Kurven zu beobachten sind, wird später bei der Diskussion des Quantendrahtsignals eingegangen.

Zusätzlich lassen sich in der Abbildung zwei weitere Effekte erkennen. Zum einen zeigt sich mit steigender Temperatur eine deutliche Abnahme der PL-Intensität. Dies kann durch die zunehmende nichtstrahlende Rekombination aufgrund der verstärkten Wechselwirkung der erzeugten Ladungsträger mit Phononen erklärt werden. Zum anderen geht die Intensitätsabnahme mit einer spektralen Verschiebung zu kleineren Energien einher.

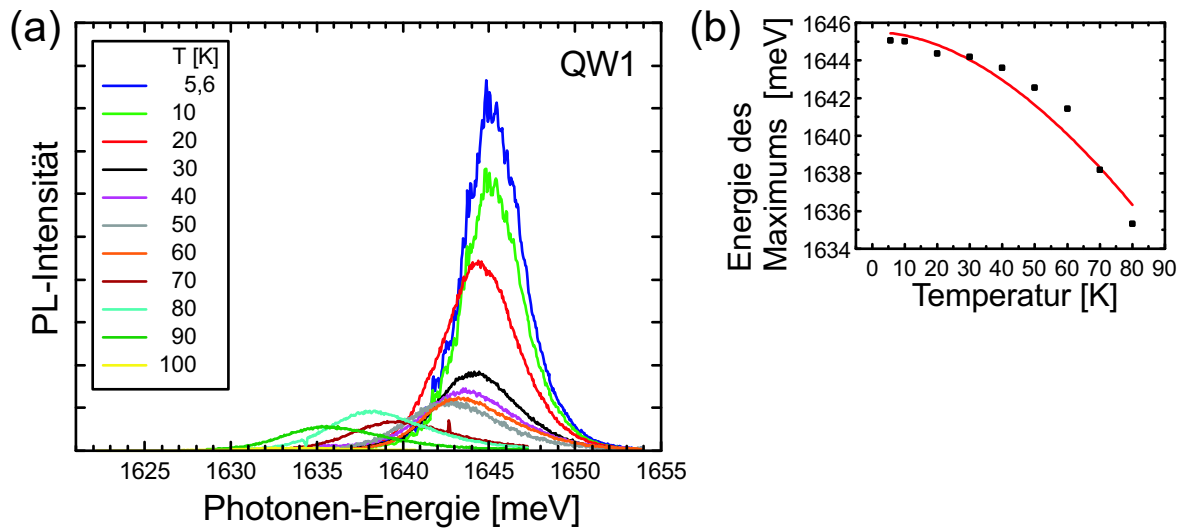


Abbildung 46: (a) Mit steigender Temperatur verliert das PL-Signal des QW1 an Intensität. Die Spektren wurden ca. $1,5 \mu\text{m}$ von der T-Kreuzung entfernt mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 2\text{--}8 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1682,6 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [011]$. (b) Die Lage des Maximums der PL-Emission verschiebt sich mit zunehmender Temperatur zu kleineren Energien. Die rote Kurve gibt den nach Gleichung (48) berechneten Verlauf wieder.

Zur Verdeutlichung ist diese Rotverschiebung mit zunehmender Temperatur auch in Teilbild (b) zu sehen, in der die durchgezogene Linie den funktionellen Zusammenhang

$$E(T) = E(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (48)$$

mit den Parametern (vergleiche [Ada94])

$$E(0) = 1645 \text{ meV}, \quad \alpha = 0,58 \frac{\text{meV}}{\text{K}} \quad \text{und} \quad \beta = 325 \text{ K}$$

repräsentiert. Diese Formel, welche die temperaturbedingte Veränderung der Bandlücke wiedergibt [Var67], ist auf die Variation des Atomabstands und auf die temperaturabhängige Elektron-Kristallgitter-Wechselwirkung zurückzuführen. Die resultierenden theoretischen Werte liegen nahe den experimentell bestimmten Datenpunkten. Auf die ebenfalls untersuchte Temperaturabhängigkeit des QW2-Signals wird hier nicht eingegangen, da die relativ geringe PL-Intensität keine verlässliche Auswertung ermöglichte.

Die bei verschiedenen Temperaturen aufgenommenen Spektren des uQWR sind in Abbildung 47 zusammengefasst. Ebenso wie beim Signal des QW1, nur viel deutlicher, ist hier das Verschwinden der charakteristischen Spitzen zu beobachten. Wie auf Seite 86 erläutert wurde, stammen diese Linien von der strahlenden Rekombination lokalisierter Exzitonen. Diese natürlichen Quantenpunkte können aber nur dann effektiv besetzt

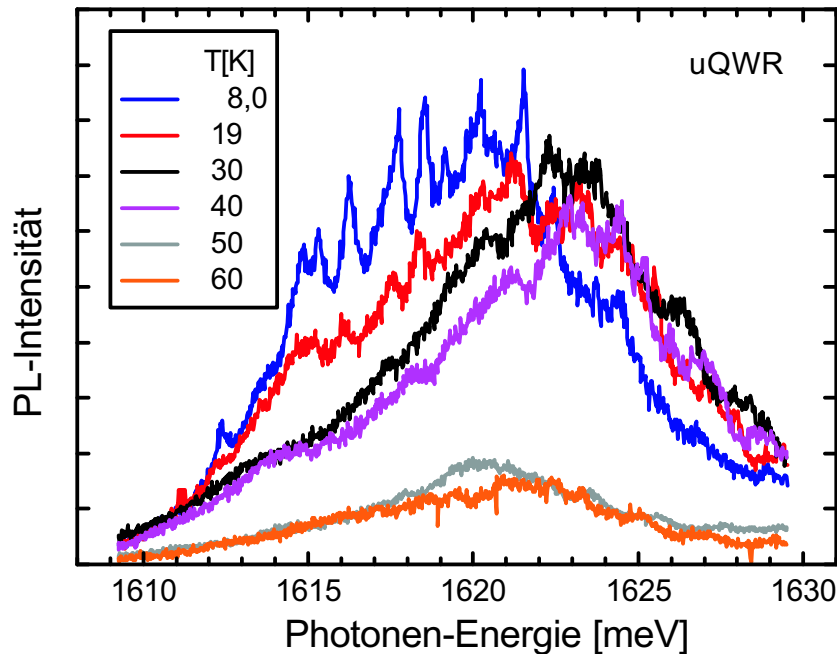


Abbildung 47: Mit zunehmender Temperatur verschwinden die charakteristischen Spitzen in den PL-Signalen des uQWR aufgrund der Anregung der Exzitonen aus den natürlichen Quantenpunkten. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 4 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1672,5 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [011]$.

werden, wenn ihre Einschlussenergie bezüglich des uQWR groß gegenüber der thermischen Energie ist. Da hier die Spitzen im Temperaturbereich von 19 bis 30 K verschwinden, lässt sich eine energetische Absenkung der Quantenpunkte von 1,6 bis 2,6 meV ermitteln. Damit stimmt die Abschätzung mit den Ergebnissen von Hasen *et al.* überein, die einen Übergang vom Quantenpunkt zum Quantendraht bei 25 K zeigen, was einer Einschlussenergie von 2,2 meV entspricht [Has97].

Neben dem Verschwinden der Spitzen zeigt das PL-Signal auch einen drastischen Intensitätseinbruch oberhalb von 40 K. Aufgrund der in Abschnitt 5.2 ermittelten Einschlussenergie von 19 meV, die einer thermischen Energie von 220 K entspricht, kommt diese Abnahme des PL-Signals überraschend und kann nur durch eine Zunahme der nicht-strahlenden Rekombinationsprozesse erklärt werden. Hier könnte ein neuer Nachheisschritt, der in Kapitel 8.1 beschrieben wird, helfen, die Probenqualität zu verbessern [Yos01a, Yos02].

Abhängig von der Temperatur variiert das Photolumineszenz-Spektrum des uQWR nicht nur in Form und Intensität, sondern zeigt auch Verschiebungen der Zentralenergie. Zunächst kann man eine Blauverschiebung beobachten. Diese wird durch die Tatsache erklärt, dass mit steigender Temperatur die an der Niederenergieflanke angesiedelten lokalisierten Exziton-Zustände zunehmend entleert werden und es so zu einer effektiven Verschiebung zu höheren Energien kommt. Die ab etwa 40 K einsetzende Rotverschiebung ist dann wieder durch die Änderung der Bandlücke mit der Temperatur bedingt (vergleiche dazu auch [Wag01]).

5.5 Leistungsabhängige Messungen

In der letzten Messreihe für die unverspannte Einfach-Quantendrahtprobe wurde die Abhängigkeit der Spektren von der Anregungsleistung untersucht. Der Anregungsfokus des Lasers hatte hierbei stets einen Durchmesser von rund 800 nm. Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse für die QW1- und die uQWR-Emission betrachtet.

Abbildung 48 zeigt die normierten PL-Signale des QW1 für eine Sequenz von Anregungsleistungen, wobei die weiteren Messparameter (siehe Bildunterschrift) nicht variiert wurden. Die Normierung erfolgte dabei bezüglich der Laserintensität. Neben der später diskutierten Tatsache, dass die normierte Intensität für kleine Anregungsleistungen nahezu konstant ist, fällt auf, dass mit steigender Laserintensität die scharfen Spitzen verschwinden. Dieses Verhalten ist darauf zurückzuführen, dass durch die endliche Anzahl der natürlichen Quantenpunkte die Signalstärke limitiert ist. Deshalb liefern

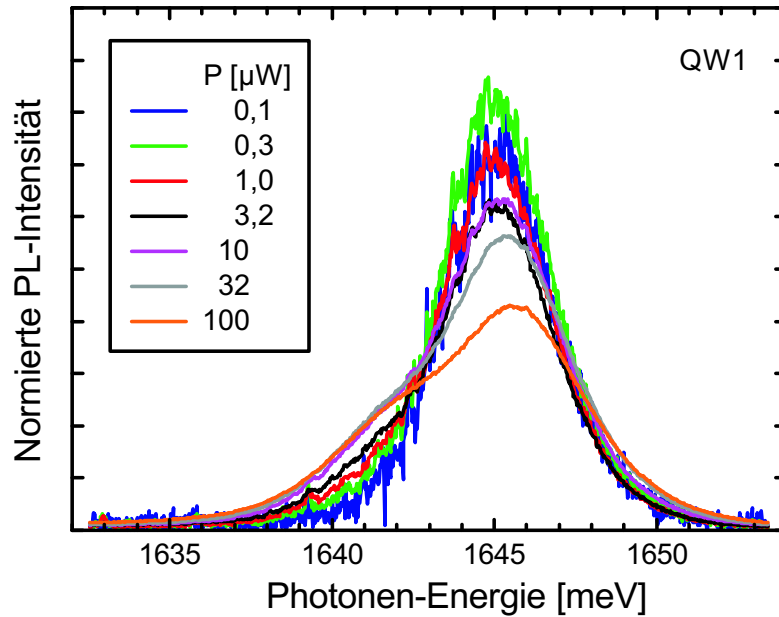


Abbildung 48: PL-Emission des QW1 für verschiedene Anregungsleistungen. Da die Spektren bezüglich der Anregungsleistung normiert sind, liegt bei geringen Laserintensitäten ein linearer Anstieg des PL-Signals vor. Die Spektren wurden ca. $1,5 \mu\text{m}$ von der T-Kreuzung entfernt mit folgenden Parametern aufgenommen: $I = 4 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1672,5 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [011]$; $T = 7,5 \text{ K}$.

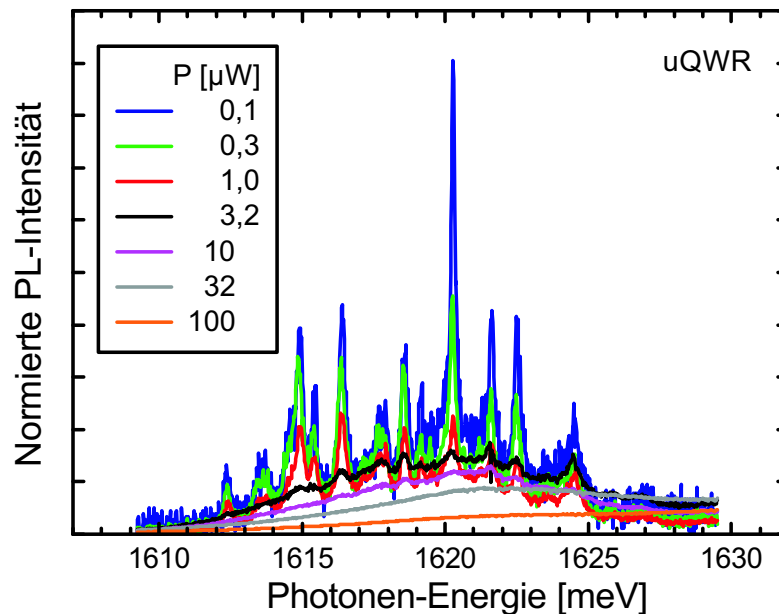


Abbildung 49: PL-Emission des uQWR für verschiedene Anregungsleistungen. In den Spektren, die bezüglich der Anregungsleistung normiert sind, verschwinden mit steigender Laserintensität die scharfen Spitzen. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern aufgenommen: $I = 4 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1672,5 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [011]$; $T = 7,6 \text{ K}$.

die lokalisierten Exzitonen für große Anregungsleistungen, die mit einer hohen freien Ladungsträgerzahl verbunden sind, nur einen verschwindenden Beitrag. Außerdem geht aus Abbildung 48 hervor, dass sich die energetische Lage des Maximums nur um weniger als 1 meV verschiebt.

Die in Abbildung 49 zusammengefassten leistungsabhängigen Spektren des uQWR lassen sich nun leicht verstehen. Werden die scharfen Spitzen nicht berücksichtigt, so ist auch hier für kleine Laserintensitäten die normierte PL-Intensität annähernd konstant. Wird die Anregungsleistung erhöht, verschwindet wieder die von lokalisierten Exzitonen stammende Emission im viel größeren Signal der freien Exzitonen. Die Lage des Maximums ändert sich erst ab $32 \mu\text{W}$ um wenige Millielektronenvolt.

Beim QW2-Signal (nicht gezeigt) ändert sich die energetische Position des Maximums ebenfalls kaum. In Abbildung 42 wurde dargestellt, wie sich die Einschlussenergie aus den Photolumineszenz-Spektren von QW2 und uQWR gewinnen lässt. Aus den nahezu konstanten energetischen Lagen dieser Signale für variierende Anregungsleistungen resultiert ein annähernd gleich bleibender Wert für die Einschlussenergie, deren quantitativer Verlauf Abbildung 50 entnommen werden kann.

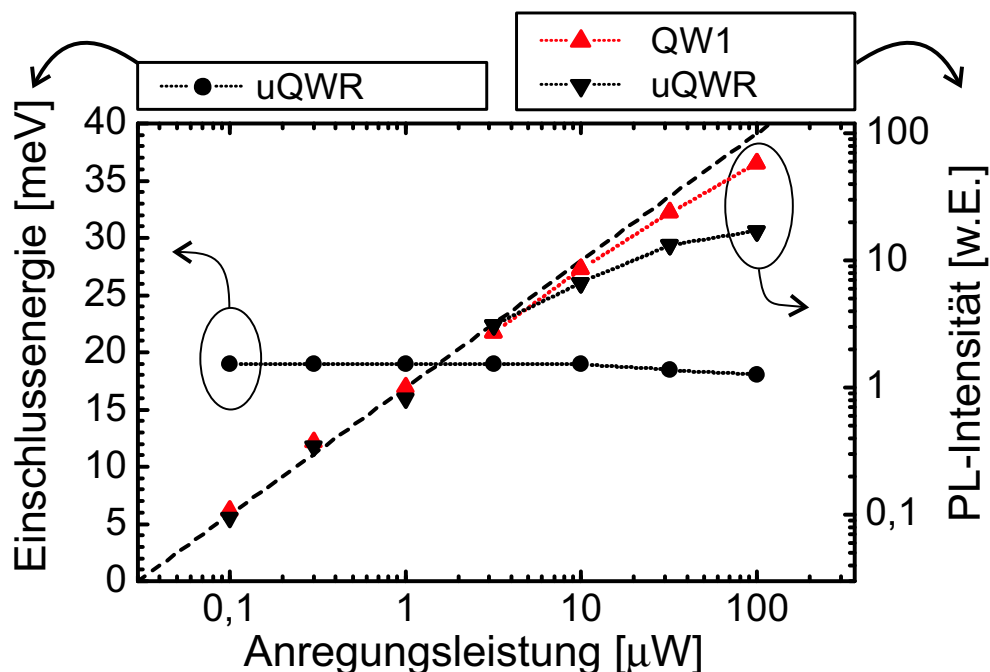


Abbildung 50: Die Einschlussenergie des uQWR ist nahezu konstant. Im Vergleich zur QW1-Emission zeigt das uQWR-Signal schon bei kleineren Anregungsleistungen Abweichungen von der Linearität. Die PL-Intensitäten sind in willkürlichen Einheiten (w.E.) aufgetragen, wobei die Linien der Orientierung dienen.

In diesem Graphen sind auch die PL-Intensitäten von QW1 und uQWR (ohne Berücksichtigung der lokalisierten Exzitonen) in Abhängigkeit von der Anregungsleistung aufgetragen. Solange genügend freie Zustände vorhanden sind, ergibt sich jeweils ein linearer Zusammenhang, der durch die gestrichelte Linie gekennzeichnet ist. Erst für höhere Intensitäten erwartet man eine Sättigung, die sich auf Bandfülleffekte zurückführen lässt: Je kleiner die Dimension ist, desto geringere Anregungsdichten reichen aus, um alle verfügbaren Zustände in den Bändern zu besetzen. Bei nulldimensionalen Quantenpunkten wird vom Zustandsfüllen gesprochen, da keine Subbänder mehr vorhanden sind.

Im vorliegenden Fall ist für das uQWR-Signal eine stärkere Abweichung vom linearen Anstieg der PL-Intensität zu beobachten, da hier alle verfügbaren Zustände schon bei kleineren Anregungsleistungen als beim Quantenfilm besetzt werden. Abbildung 50 zeigt den Vergleich mit den QW1-Datenpunkten, die sich näher an der gestrichelten Linie befinden. Zudem macht der Graph deutlich, dass die in dieser Arbeit gewählte Standardanregungsleistung von $1,0 \mu\text{W}$ unterhalb des nichtlinearen Bereichs liegt. Dieser beginnt – in Übereinstimmung mit Referenz [Gon92] – bei etwa $5 \mu\text{W}$.

5.6 Zusammenfassung

Mit Hilfe der hohen räumlichen und spektralen Auflösung des Mikro-Photolumineszenz-Aufbaus wurde das Signal eines unverspannten Quantendrahts identifiziert. Die Einschussenergie von 19 meV stimmt gut mit dem berechneten Wert von 18 meV überein und bleibt nahezu konstant, wenn man die Anregungsleistung über drei Größenordnungen variiert. Grenzflächenrauigkeiten an Heteroübergängen lassen natürliche Quantenpunkte entstehen. Die strahlende Rekombination dort lokalisierter Exzitonen hat zur Folge, dass in den Spektren von Quantenfilm (QW2) und Quantendraht (uQWR) scharfe Spitzen auftreten.

Die PL-Emission des uQWR ist vorwiegend in $[011]$ -Richtung polarisiert und zeigt eine starke Intensitätsabnahme ab etwa 40 K . Temperaturabhängige Messungen ergeben eine mit Literaturwerten übereinstimmende Potentialtiefe der natürlichen Quantenpunkte von rund 2 meV bezüglich des Quantendrahts. Thermische Anregung aus diesen Potentialminima und die Bandlückenverkleinerung mit steigender Temperatur sorgen für einen Übergang von einer spektralen Blau- zu einer Rotverschiebung des PL-Signals. Mit steigender Anregungsleistung verschwinden die scharfen Spitzen im großen Signal der freien Exzitonen und es kommt zu Sättigungseffekten in der PL-Intensität.

6 Struktur mit verspannten T-förmigen Kreuzungen

Alle in diesem Abschnitt diskutierten Experimente untersuchen Proben, bei denen Verspannungen gezielt zur Strukturgestaltung genutzt werden. Im vorliegenden Fall ersetzen $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ -Lagen den (100)-Quantenfilm aus GaAs, der die Grundlage für den unverspannten Einfach-Quantendraht bildete. Die Strukturen weisen eine Vielzahl nahe aneinander liegender T-förmiger Kreuzungen auf, die die Durchführung von Röntgenmessungen ermöglichen. Außerdem ist so ein stärkeres PL-Signal detektierbar.

6.1 Probenaufbau

Die untersuchten Strukturen besitzen je 50 T-förmige Kreuzungen, die mit dem CEO-Verfahren hergestellt wurden. Nach einem 100 nm dicken Puffer aus GaAs bildet ein $2,5\text{ }\mu\text{m}$ breites Übergitter aus abwechselnd 40 nm $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ und 10 nm $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ die wesentliche Schichtsequenz des [100]-Wachstums. In Abbildung 51 sind in den vergrößerten Darstellungen zwei der 50 $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ -Verspannungslagen zu sehen, die den vertikalen Teil der T-förmigen Struktur bilden. Nach 40 nm $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ schließt eine 10 nm dicke Deckschicht aus GaAs den ersten Wachstumsschritt ab.

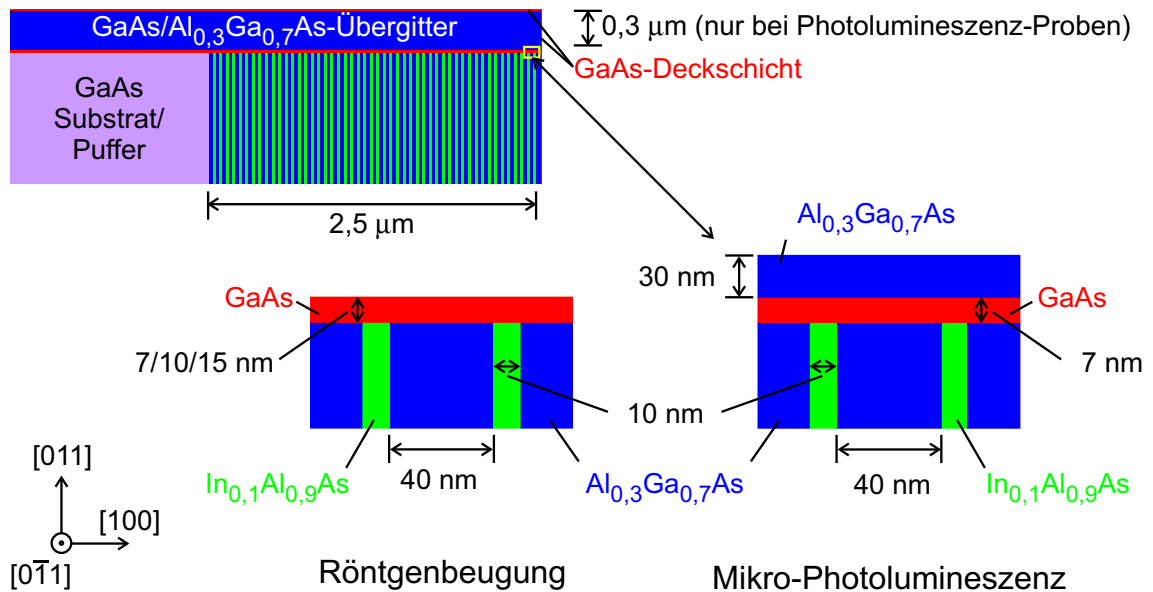


Abbildung 51: Die Ausschnitte zeigen die wesentlichen Teile der verspannten Probenstrukturen, die mit Röntgenbeugungsexperimenten und Mikro-Photolumineszenz-Messungen untersucht wurden.

Bei der später beschriebenen speziellen Methode der Röntgenbeugung unter streifendem Einfall sollte die untersuchte Schicht offen liegen. Deshalb wurde im [011]-Wachstum ausschließlich GaAs abgeschieden. Die Dicke dieser Schicht beträgt für die zunächst vorgestellten Messungen 10 nm. Weitere Proben mit 7 und 15 nm breiten GaAs-Lagen wurden ebenfalls untersucht.

Ab Kapitel 6.4 werden Mikro-Photolumineszenz-Experimente diskutiert. Die dort behandelte Struktur (Identifikationsnummer 06.20.01.3d(r)) weist lediglich im zweiten Wachstumsschritt Unterschiede zu den Proben auf, die mit Röntgenbeugung untersucht wurden. Die schematische Struktur ist in Abbildung 51 rechts unten zu sehen. Eine 30 nm breite Barriere aus $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$, die in [011]-Richtung in Anschluss an den 7 nm breiten GaAs-Quantenfilm gewachsen wurde, ermöglicht Photolumineszenz-Messungen. Weiterhin kann man in [100]-Richtung $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barrieren erkennen, deren Breite – wie bereits erwähnt – nur 40 nm beträgt. Der relativ kleine Abstand zwischen den Verspannungsschichten hat den Nachteil, dass eine Detektion individueller Quantendrahtsignale verhindert wird, da der Detektionsfokus einen Durchmesser von rund 800 nm aufweist. Das an die $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barriere in [011]-Richtung anschließende 300 nm dicke Übergitter aus abwechselnden Lagen aus GaAs (2 nm) und $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ (8 nm) sorgt dafür, dass die T-förmigen Kreuzungen für die orts aufgelösten Messungen weit genug vom Probenrand entfernt sind. Erneut wird die Struktur mit einer 10 nm dicken GaAs-Deckschicht abgeschlossen.

6.2 Röntgenbeugung unter streifendem Einfall

Der strukturelle Probenaufbau und eingebaute Verspannungen können mit Hilfe von Röntgenbeugungsexperimenten bestimmt und nachgewiesen werden. Im vorliegenden Fall ist die Überprüfung der in Abschnitt 3.4 prognostizierten Verzerrungsprofile von besonderem Interesse. Vor allem will man wissen, ob sich die eingebauten Verspannungen auf die überwachsene Schicht übertragen. Deswegen müssen die Messungen spezifisch die Verzerrungen in der CEO-Lage untersuchen. Dazu ist es notwendig, dass die Röntgenstrahlung unter einem sehr kleinen Winkel auf die Probe trifft.

Diese Methode der zerstörungsfreien Untersuchung des lateralen Verzerrungsprofils oberflächennaher Schichten wird als „Röntgenbeugung unter streifendem Einfall“ (GID, engl.: grazing incidence diffraction) bezeichnet. Sie nutzt die Tatsache aus, dass der kleine Einfallswinkel (bezüglich der Probenoberfläche) für eine Eindringtiefe im Nanometerbereich sorgt, die frei gewählt werden kann. Auf diese Weise kombiniert das

Verfahren einen Beugungsprozess an Kristallebenen senkrecht zur Probenoberfläche mit der Tiefenempfindlichkeit von Röntgenstrahlen.

Für die Messungen ist eine Röntgenquelle mit hoher Brillanz erforderlich, da das GID-Signal um Größenordnungen schwächer ist als der eintreffende Strahl. Deshalb wurden die Experimente am Strahlrohr (engl.: beamline) ID1 der Europäischen Synchrotronstrahlungsanlage (engl.: European Synchrotron Radiation Facility) in Grenoble durchgeführt. So sind die in diesem Abschnitt gezeigten Resultate das Ergebnis einer Kooperation mit Michael Sztucki, der in seiner Dissertation InAs/GaAs-Nanostrukturen mit Hilfe von Synchrotronstrahlung untersuchte [Szt04].

Die Energie des einfallenden Strahls kann bei hoher Auflösung im Bereich von 2,1 bis 40 keV gewählt werden. Das Röntgendiffraktometer besitzt vier Freiheitsgrade zur Proben- und zwei zur Detektorpositionierung. Mit ihm werden die zwei Ein- und die zwei Ausfallswinkel eingestellt, die den Streuprozess kennzeichnen. Die Lage der entsprechenden Wellenvektoren \vec{k}_i und \vec{k}_f mit $|\vec{k}_i| = |\vec{k}_f| = 2\pi/\lambda$ ist in Abbildung 52 dargestellt. Mit λ wird hier die Wellenlänge der monochromatischen Röntgenstrahlung bezeichnet, während sich die Indizes i und f auf den Anfangs- (engl.: initial) und den Endzustand (engl.: final state) des Beugungsprozesses beziehen.

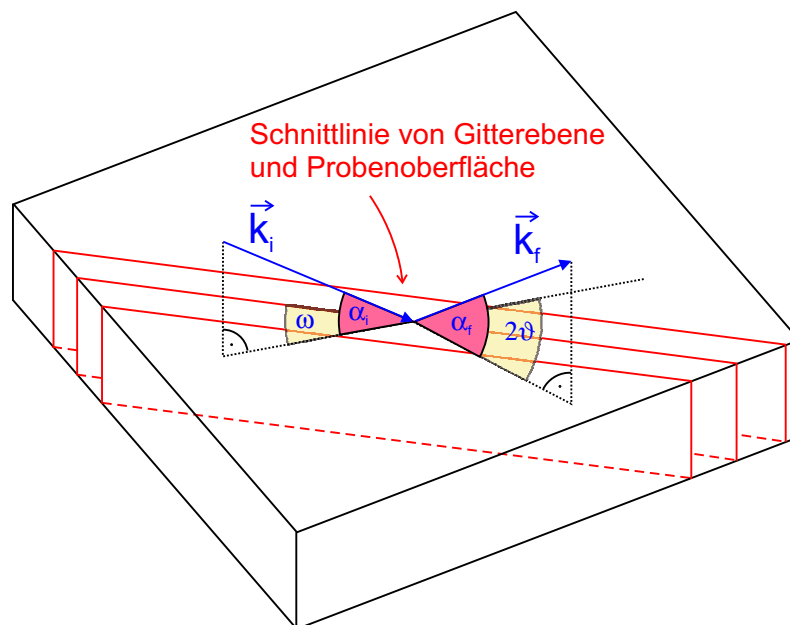


Abbildung 52: Winkeldefinitionen für Röntgenbeugung in GID-Geometrie. Die den streifenden Ein- und Ausfall kennzeichnenden Winkel α_i und α_f sind stark vergrößert eingezeichnet.

Zunächst ist es sinnvoll, α_i und α_f , also die Ein- und Ausfallswinkel bezüglich der Probenoberfläche, gedanklich null zu setzen. Dann wird deutlich, dass die Winkel ω und 2ϑ der üblichen Notation für die konventionelle Röntgenbeugung entsprechen, da sie bezüglich der Gitterebenen gemessen werden, die zum untersuchten Röntgenreflex gehören. Die Winkel α_i und α_f sind in der Skizze stark vergrößert eingezeichnet. In Wirklichkeit haben sie Werte unterhalb von 1° und sorgen so für den streifenden Einfall der Röntgenstrahlen auf die Probe. Insgesamt stehen bei den Messungen in GID-Geometrie vier Winkel nur drei Komponenten des Impulsübertrags $\vec{Q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ gegenüber. Aus diesem Grund kann eine Größe frei gewählt werden. Meist ist das der Einfallswinkel α_i , der die Eindringtiefe festlegt.

Das Experiment liefert eine Verteilung von Ausfallsvektoren \vec{k}_f mit zugehörigen Winkeln α_f . Die Signale können mit Hilfe eines positionsempfindlichen Detektors aufgenommen werden, der senkrecht zur untersuchten Oberfläche orientiert ist. Für die Festlegung des exakten Einfallswinkels ist es wichtig, den kritischen Winkel α_c (bezüglich der Oberfläche) für die Totalreflexion zu kennen. Gibt man den Winkel $\tilde{\alpha}_c = 90^\circ - \alpha_c$ anders als in Abbildung 52 bezüglich des Lots auf der Oberfläche an, dann gilt nach Snellius [Cor96]:

$$\sin \tilde{\alpha}_c = n_R.$$

Für Röntgenstrahlen im Festkörper ist der Realteil des Brechungsindex n_R sehr nahe an 1, dem Wert im Vakuum. Deswegen ist der kritische Winkel α_c sehr klein und liegt typischerweise bei weniger als 1° . Trifft der einfallende Röntgenstrahl unter einem noch kleineren Winkel α_i streifend auf die Probe, so ist die Bedingung für Totalreflexion erfüllt und die Eindringtiefe beträgt nur wenige Nanometer. Jenseits des kritischen Winkels steigt die Eindringtiefe rasch an. Bei der Röntgenbeugung unter streifendem Einfall handelt es sich um einen kontinuierlichen Prozess ohne scharfe Grenze. Auch für festes α_f wird die Tiefeninformation stets nur kumulativ gemessen.

Der starke Intensitätsabfall unter Totalreflexion auf einer Länge von wenigen Nanometern bietet die Möglichkeit, die Verspannungen in der CEO-Schicht unabhängig von denen des ersten Wachstumsschritts zu untersuchen. So können Variationen der Gitterkonstante innerhalb des aus reinem GaAs bestehenden überwachsenen Quantenfilms von denen des $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}/\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Übergitters getrennt werden.

Für die Auswertung verwendet man gewöhnlich ein relatives Koordinatensystem. Wie in Abbildung 53 zu sehen ist, wird der Vektor \vec{Q} in seine Anteile \vec{Q}_z und \vec{Q}_\parallel ($= \vec{Q}_x + \vec{Q}_y$) senkrecht und parallel zur Probenoberfläche zerlegt. Die parallele Komponente wiederum kann in \vec{Q}_{rad} und \vec{Q}_{ang} aufgeteilt werden. Der radiale Anteil \vec{Q}_{rad} ist dabei senkrecht,

lisierende, binäre GaAs lassen sich mit den atomaren Formfaktoren für Gallium und Arsen (f_{Ga} und f_{As}) folgende Ausdrücke herleiten [Szt04]:

$$h, k, l \text{ gerade und } h + k + l = 4n + 2: |F_{hkl}|^2 = 16(f_{\text{Ga}} - f_{\text{As}})^2, \quad (49)$$

$$h, k, l \text{ gerade und } h + k + l = 4n: |F_{hkl}|^2 = 16(f_{\text{Ga}} + f_{\text{As}})^2, \quad (50)$$

$$h, k, l \text{ ungerade: } |F_{hkl}|^2 = 16(f_{\text{Ga}}^2 + f_{\text{As}}^2),$$

$$h, k, l \text{ gerade/ungerade gemischt: } |F_{hkl}|^2 = 0. \quad (51)$$

Da die Reflexe (100) und (0 $\bar{1}1$) nach Gleichung (51) nicht auftreten, werden für die GID-Untersuchungen die Reflexe (200) und (0 $\bar{2}2$) verwendet. Zwar ist der (200)-Reflex gemäß Gleichung (49) in dem Sinn schwach, dass er von der Differenz der atomaren Formfaktoren abhängt, während der (400)-Reflex deren Summe beinhaltet, wie Gleichung (50) zeigt. Aufgrund der Tatsache, dass sich die Intensität im Experiment auch mit steigender Ordnung des Reflexes verringert [War69], kann aber durchaus der (200)-Reflex gewählt werden. Da die atomaren Formfaktoren von der Energie der einfallenden Röntgenstrahlen abhängen, ist lediglich zu beachten, dass sich ihre Werte für die gewählte Wellenlänge deutlich unterscheiden. In einem anderen Messverfahren kann man jedoch die Gleichheit der Formfaktoren gezielt ausnutzen, um elementspezifische Untersuchungen durchzuführen. So könnte diese Methode der „anormalen Streuung“ in zukünftigen Experimenten auch für CEO-Strukturen nützlich sein.

Um die Braggreflexe (200) und (0 $\bar{2}2$) zu untersuchen, muss der CEO-Probenhalter um 90° gedreht werden, wie in Abbildung 54 deutlich wird. Für beide Konfigurationen ist neben dem unter dem Winkel α_f auf den Detektor treffenden GID-Strahl ein zweiter eingezeichnet, der ebenso von einem ω -2 ϑ -Beugungsprozess herrührt. Letzterer stammt jedoch von der konventionellen Röntgenbeugung am [100]-Übergitter. Dieser Strahl tritt auf, weil die durch die Eintrittsspalte definierte Größe des Röntgenstrahlfokus $100 \times 100 \mu\text{m}^2$ beträgt. Bei allen Messungen traf der Strahl unter einem Winkel $\alpha_i = 0,4^\circ$ streifend auf die rund $100 \mu\text{m}$ hohe Spaltfläche. Bei einem Braggwinkel von $12,3^\circ$ (resultierend aus der gewählten Röntgenwellenlänge von 120 pm) ist eine Beleuchtung der Probenoberfläche unvermeidlich. Die Bedingungen der gewöhnlichen Röntgenbeugung sorgen dafür, dass der gestreute Strahl unter dem Winkel α_i den Detektor erreicht, wie in Abbildung 54 zu sehen ist.

Der Winkelunterschied zwischen dem konventionellen Reflex und dem Maximum des α_f -Spektrums beträgt $\alpha_i + \alpha_f$ mit $\alpha_f \approx \alpha_i + \alpha_c$ [Szt04]. Für den Unterschied ergibt sich ein Wert von nur $1,2^\circ$, wenn ein typisches α_c von $0,4^\circ$ angenommen wird. Als Folge können die Ausläufer des um Größenordnungen stärkeren konventionellen Signals des [100]-Übergitters das GID-Signal teilweise überdecken. Im Fall des (0 $\bar{2}2$)-Reflexes ist

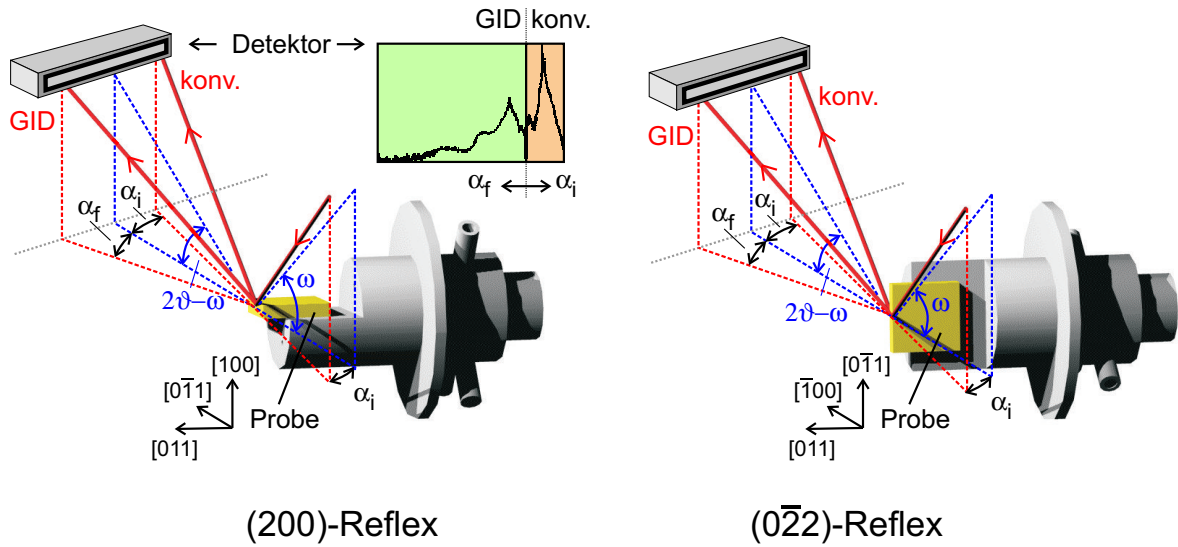


Abbildung 54: Experimentelle Anordnung für die Röntgenmessungen am (200)- und (022)-Reflex (nach [Szt04]). Neben dem GID-Strahl wird ein zweites, von einem konventionellen (konv.) Röntgenprozess stammendes Signal detektiert.

die Lage günstiger, da man hier den konventionellen Strahl in Transmission detektiert. Eine nach Beendigung der ersten Strahlzeit gefundene Lösung für das Problem am (200)-Reflex wird am Ende des folgenden Abschnitts vorgestellt.

6.3 Nachweis der Verspannungsmodulationen

Vor der eben erfolgten Unterscheidung zwischen GID- und konventionellem Strahl wurde die Wahl der beiden zu untersuchenden Braggreflexe (200) und (022) begründet und die Bedeutung von radialen und angularen Aufnahmen diskutiert. Diese drei Parameter (Strahltyp, Braggreflex, Aufnahmeart) erlauben insgesamt acht Konfigurationen, die im Folgenden systematisch vorgestellt werden (siehe auch [Szt03]). Beginnend mit der konventionellen Röntgenbeugung wird zunächst die radiale und angulare Messung am (022)-Reflex präsentiert. Nach der Diskussion der (200)-Beugungsergebnisse folgen dann die analogen Röntgenspektren für den GID-Fall.

Die zunächst gezeigten Aufnahmen für alle acht Konfigurationen stammen aus der ersten Strahlzeit, in der die grundlegenden Konzepte überprüft wurden. Der Abschnitt wird durch quantitative Ergebnisse für ausgewählte Geometrien abgerundet, die sich mit verbesserter Messanordnung in weiteren Experimenten erzielen ließen.

Grundlegende Ergebnisse

Abbildung 55(a) zeigt die aufgenommenen Spektren für die konventionelle Röntgenbeugung am $(0\bar{2}2)$ -Reflex. Die Variable q ist dabei bezüglich des Impulsübertrags Q_{Bragg} definiert, der zum untersuchten Braggreflex gehört:

$$q = Q - Q_{\text{Bragg}}.$$

Der eingesetzte Graph stellt das Ergebnis der radialen Aufnahme dar. Da diese entlang der $[0\bar{1}1]$ -Richtung verläuft, in der die Probenstruktur translationsinvariant ist, sind wie erwartet neben dem Maximum des Braggreflexes keine weiteren Satellitenmaxima zu beobachten.

Im Gegensatz dazu zeigt die angulare Aufnahme mehrere Nebenmaxima im Abstand von $\Delta q_{\text{ang}} = 0,128 (\pm 0,001) \text{ nm}^{-1}$. Diese Röntgenmessung untersucht die $[100]$ -Richtung und kann so die Übergitterperiode des ersten Wachstumsschritts detektieren. Die Schichten der $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}/\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Sequenz sind verspannt, jedoch können angulare Aufnahmen – wie bereits erwähnt – solche Gitterdehnungen nicht registrieren. Vielmehr ist es der offensichtliche Unterschied in der chemischen Zusammensetzung zwischen $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ und $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$, der hier detektiert wird. Unter Zuhilfenahme der Beziehung $p = 2\pi/\Delta q_{\text{ang}}$ reproduziert das Experiment mit $p = 49,1 (\pm 0,4) \text{ nm}$ gut die nominelle Übergitterperiode von 50 nm.

In Abbildung 55(b) kann man im eingesetzten Graphen die angulare Aufnahme sehen. Da hier die Röntgenspektren am (200) -Reflex dargestellt sind, wird wie zuvor bei der radialen Aufnahme am $(0\bar{2}2)$ -Reflex aufgrund der Translationsinvarianz in $[0\bar{1}1]$ -Richtung keine Signalmodulation erwartet. Die radiale Aufnahme hingegen zeigt deutliche Oszillationen. Hier sind die Nebenmaxima deutlich ausgeprägter als für die angulare $(0\bar{2}2)$ -Aufnahme. Das ist verständlich, da radiale Aufnahmen neben Zusammensetzungsvariationen auch Gitterdehnungen detektieren können. Diese sind aufgrund der unterschiedlichen Gitterkonstanten von $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ und $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ vorhanden. In Übereinstimmung zu oben ergibt sich die Übergitterperiode zu $49,1 (\pm 0,4) \text{ nm}$.

Nach dieser Diskussion aller konventionellen Reflexe werden nun die GID-Spektren präsentiert. Abbildung 56(a) stellt dabei die Messungen am $(0\bar{2}2)$ -Reflex dar. Aus den gleichen Gründen wie oben zeigt die für die $[0\bar{1}1]$ -Richtung empfindliche radiale Aufnahme im eingesetzten Graphen keine Nebenmaxima.

Interessant sind nun die Resultate der angularen Aufnahme, die in $[100]$ -Richtung sensitiv ist. Anders als im analogen Spektrum der konventionellen Röntgenbeugung in

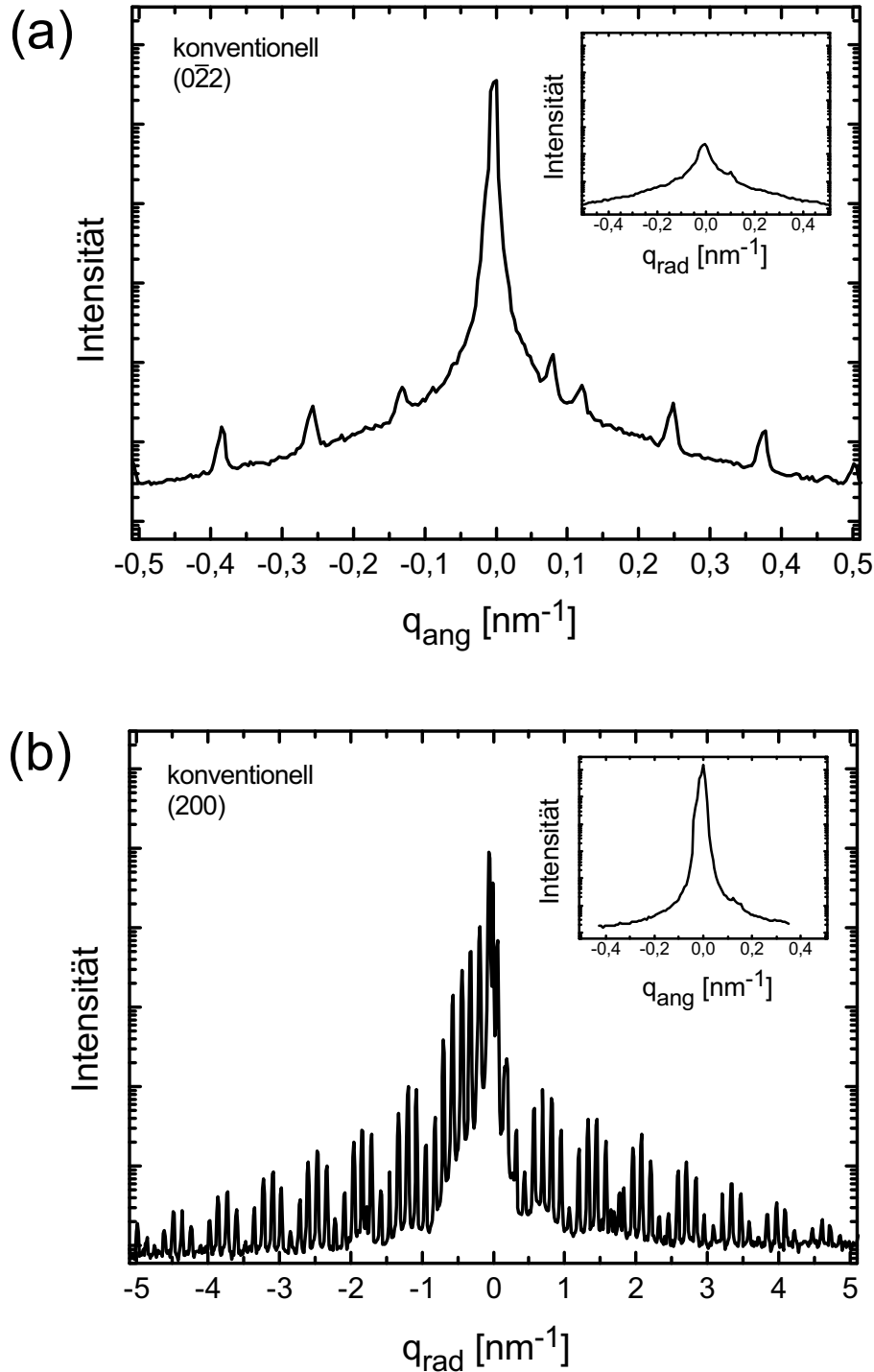


Abbildung 55: Konventionelle Röntgenbeugung am $(0\bar{2}2)$ -Reflex (a) und am (200) -Reflex (b). Die Oszillationen korrespondieren mit den Zusammensetzungs- bzw. Gitterkonstantenvariationen der $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}/\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Schichtfolge in $[100]$ -Richtung. Die Abszisse der radialen Aufnahme in (b) erstreckt sich über einen größeren Wertebereich als in (a). In den eingesetzten Graphen verlaufen die Aufnahmen entlang der translationsinvarianten $[0\bar{1}1]$ -Richtung.

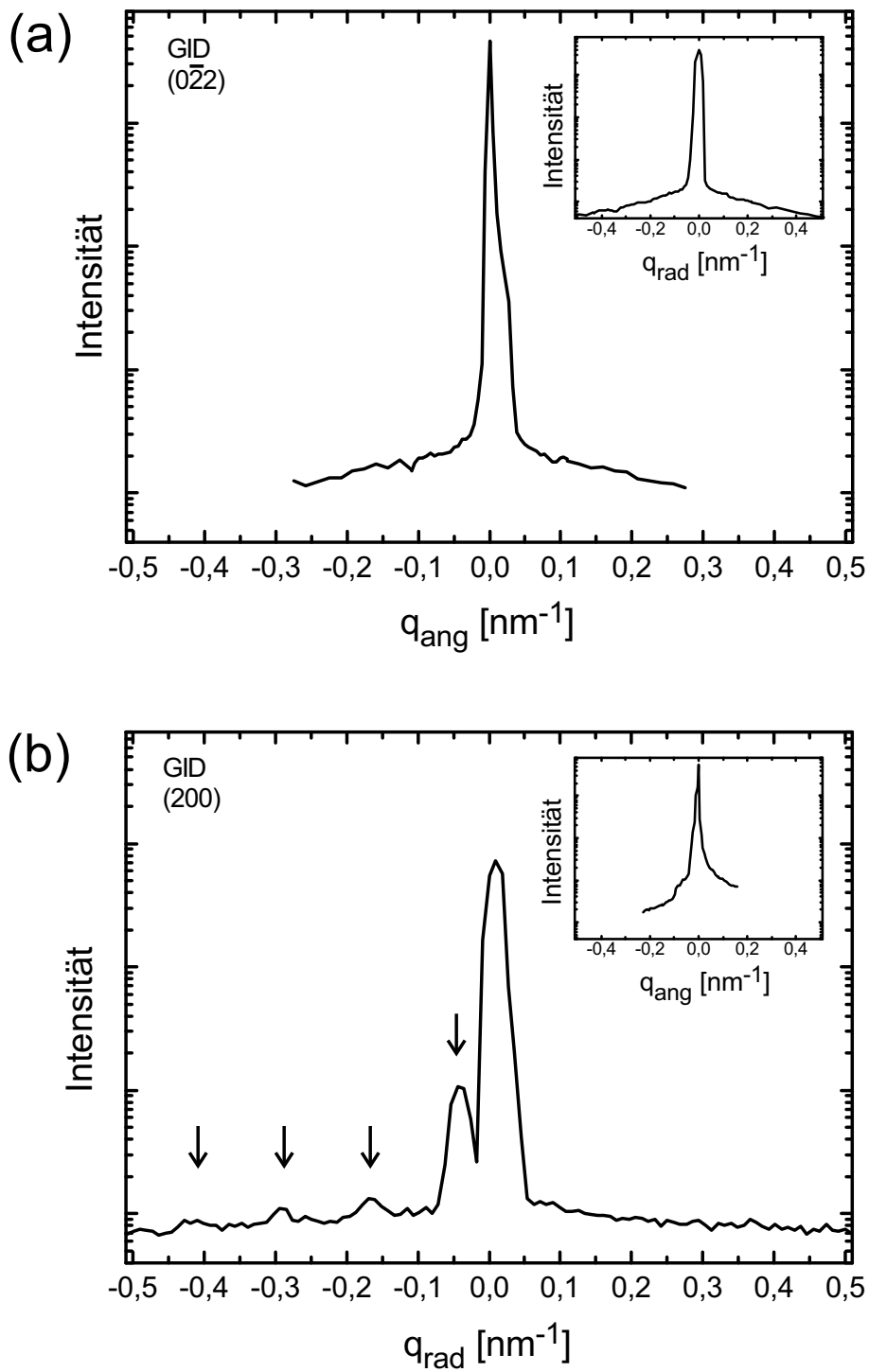


Abbildung 56: GID-Spektrum am $(0\bar{2}2)$ -Reflex (a) und am (200) -Reflex (b). Die mit den Pfeilen gekennzeichneten Satellitenmaxima sind Beweis für die Gitterkonstantenmodulationen in der überwachsenen Schicht, die in $[100]$ -Richtung vorhanden sind. In den eingesetzten Graphen verlaufen die Aufnahmen entlang der translationsinvarianten $[0\bar{1}1]$ -Richtung.

Abbildung 55(a) kann man hier keine Satellitenmaxima erkennen. Das beobachtete Verhalten ergibt sich, weil Röntgenbeugung unter streifendem Einfall nur die CEO-Schicht untersucht. Da diese Lage aus reinem GaAs besteht, sind keine Zusammensetzungsvariationen zu erwarten. Grundsätzlich besteht auch die Möglichkeit, dass Indium-Atome während des Wachstums in die CEO-Lage wandern und Zusammensetzungsmodulationen entstehen. Aufgrund der Ergebnisse der angularen Aufnahme können solche Diffusionsprozesse jedoch ausgeschlossen werden. Darüber hinaus stellt das gezeigte Spektrum den Beweis dar, dass mit Röntgenbeugung unter streifendem Einfall die überwachsene Schicht unabhängig von den Lagen des [100]-Wachstums untersucht werden kann. Dieses wichtige Resultat ist für die Interpretation der weiteren Messungen von Bedeutung.

Abbildung 56(b) zeigt nun die GID-Spektren am (200)-Reflex. Wieder weist die angulare Aufnahme im eingesetzten Graphen aufgrund der Invarianz in $[0\bar{1}1]$ -Richtung keine Besonderheiten auf. Die radiale Aufnahme in [100]-Richtung zeigt jedoch Modulationen, die erneut einer Periode von $49,1 (\pm 0,4)$ nm entsprechen. Aufgrund des Aufnahmetyps können die Modulationen von Kompositions-/Morphologievariationen oder von Verspannungen des Gitters stammen. Erstere können jedoch durch die in Abbildung 56(a) gezeigte angulare Aufnahme ausgeschlossen werden. Demnach sind Modulationen der Gitterkonstante in [100]-Richtung nachgewiesen. Mit den vorangegangenen Erkenntnissen sind diese klar in der überwachsenen Schicht lokalisiert. Die erwünschten Gitterkonstantenmodulationen in der CEO-Schicht sind somit vorhanden und lassen die Ausbildung verspannter Quantendrähte möglich erscheinen.

In den bisher gezeigten Spektren wurde stets die Intensität als Funktion von q_{rad} oder q_{ang} aufgetragen. Durch die Ortsauflösung des Detektors können zusätzlich Tiefeninformationen (Impulsübertrag Q_z) gewonnen werden. Hier nutzt man die Tatsache aus, dass die Röntgenstrahlen bei jeder Aufnahme nicht nur für einen Ausfallswinkel α_f detektiert werden, sondern für einen Winkelbereich. Abbildung 57(a) gibt ein farbkodiertes $q_{\text{rad}}-q_z$ -Diagramm wieder, bei dem die Integration entlang der vertikalen Achse das in Abbildung 56(b) gezeigte Spektrum reproduziert. Für festes q_{rad} sind auch in q_z -Richtung Oszillationen erkennbar.

Die Abbildungen 57(b) und (c) zeigen Schnitte für ausgewählte Werte von q_{rad} , die in (a) mit Pfeilen markiert sind. Man kann je drei Kurven sehen, da alle bisher diskutierten Messungen nicht nur an einer Probe durchgeführt wurden, sondern an drei Strukturen, die sich nur in der Dicke d_{011} des überwachsenen Quantenfilms unterscheiden. Zur besseren Übersicht wurden bislang nur die Daten für die Probe vorgestellt, deren CEO-Schicht 10 nm breit ist, da alle Experimente übereinstimmende Resultate lieferten.

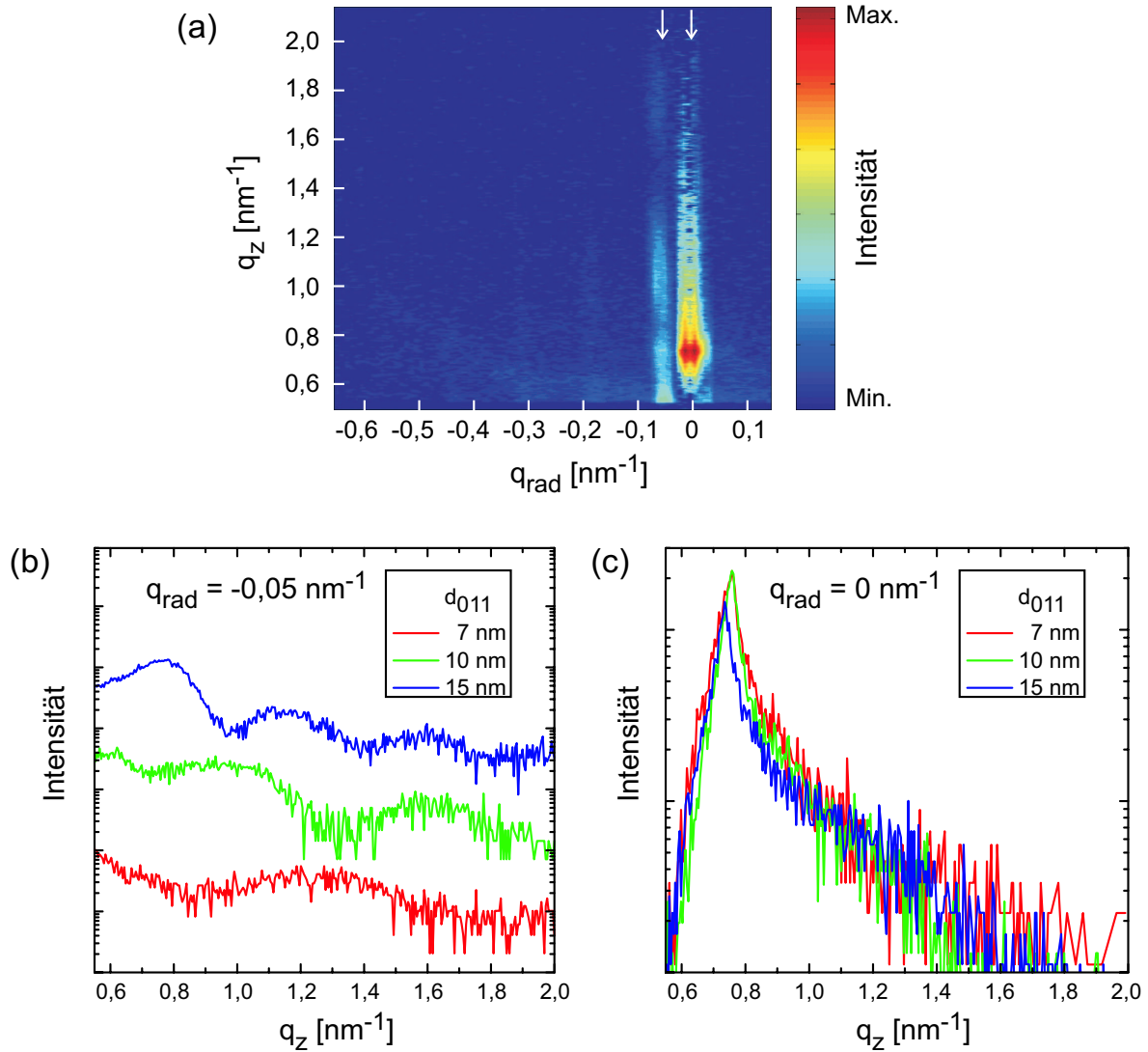


Abbildung 57: (a) Tiefenaufgelöstes GID-Signal am (200)-Reflex. Die Integration entlang der vertikalen Achse ergibt das in Abbildung 56(b) gezeigte Spektrum. Die vertikalen Schnitte (b) und (c) beziehen sich auf die in (a) mit Pfeilen gekennzeichneten Positionen des Haupt- und des stärksten Satellitenmaximums und spiegeln die untersuchten Probenbereiche wider.

Während in Teilbild (b) am stärksten Satellitenmaximum ($q_{\text{rad}} = -0,05 \text{ nm}^{-1}$) Oszillationen auftreten, fällt direkt am GaAs-Braggreflex ($q_{\text{rad}} = 0 \text{ nm}^{-1}$) die Signalstärke monoton (c). Der Unterschied folgt daraus, dass das erste Signal mit den Gitterdehnungen der überwachten Schicht korreliert, während das zweite seinen Ursprung im großen unverspannten Bereich der Probenoberfläche hat. Aus diesem Grund entsprechen die in (a) gemessenen Perioden mit $7,1 (\pm 0,2)$, $10,1 (\pm 0,4)$ und $15,2 (\pm 0,5) \text{ nm}$ gerade den nominellen Schichtdicken.

Verbesserte Messanordnung

Wie bereits zuvor erwähnt, wurde nach Abschluss der systematischen Messungen eine einfache Lösung zur Vermeidung des starken, vom $[100]$ -Übergitter herrührenden Signals der konventionellen Röntgenbeugung gefunden. In Abbildung 54 zur Probenhalteranordnung für die Messungen am (200) -Reflex ist ein typisches Spektrum zu sehen, das mit dem Detektor aufgenommen wurde. Deutlich sind die Signale des GID- und des konventionellen Strahls zu erkennen. Wie jedoch Abbildung 58 zeigt, verschwindet letzteres, wenn der Probenhalter um 180° gedreht wird, da man in dieser Geometrie die Substratseite der Probe beleuchtet. Deshalb untersucht die in Abbildung 58 dargestellte Anordnung genau genommen den $(\bar{2}00)$ -Reflex. Im Folgenden wird die bisherige Notation „ (200) “ beibehalten, da zu beiden Reflexen dieselben Gitterebenen gehören.

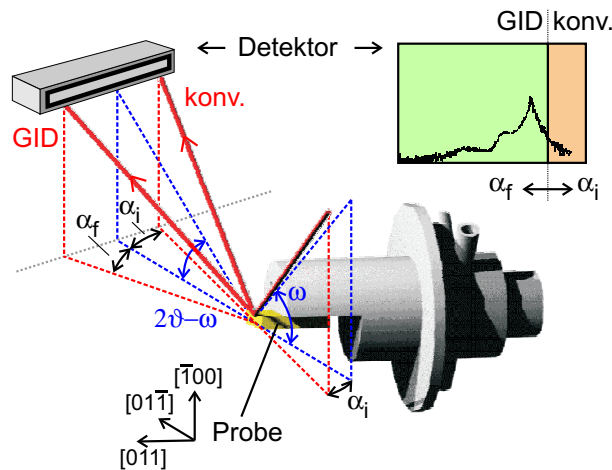


Abbildung 58: Verbesserte experimentelle Anordnung für Röntgenmessungen am (200) -Reflex (nach [Szt04]). Der Probenhalter ist im Vergleich zu Abbildung 54 um 180° gedreht.

Mit der verbesserten Anordnung konnten einige ausgewählte Messungen in einer zweiten Strahlzeit wiederholt werden. Die Wellenlänge der Röntgenstrahlen betrug dieses Mal 172 pm. Zunächst zeigt Abbildung 59(a) die radiale Aufnahme für die konventionelle Röntgenbeugung am (200) -Reflex. Im Gegensatz zu Abbildung 55(b) sind keine Oszillationen zu erkennen. Dieses Verhalten entspricht den Erwartungen für die veränderte Geometrie, da jetzt das Substrat beleuchtet wird und so das Übergitter des ersten Wachstumsschritts auf der den Röntgenstrahlen abgewandten Probenseite liegt.

Diese neue Messanordnung ist auch für die Detektion des GID-Signals am (200) -Reflex vorteilhaft. Die schwarze Kurve in Abbildung 59(b) zeigt die radiale Aufnahme, bei der die Abszisse im Vergleich zu Abbildung 56(b) einen größeren Wertebereich aufweist.

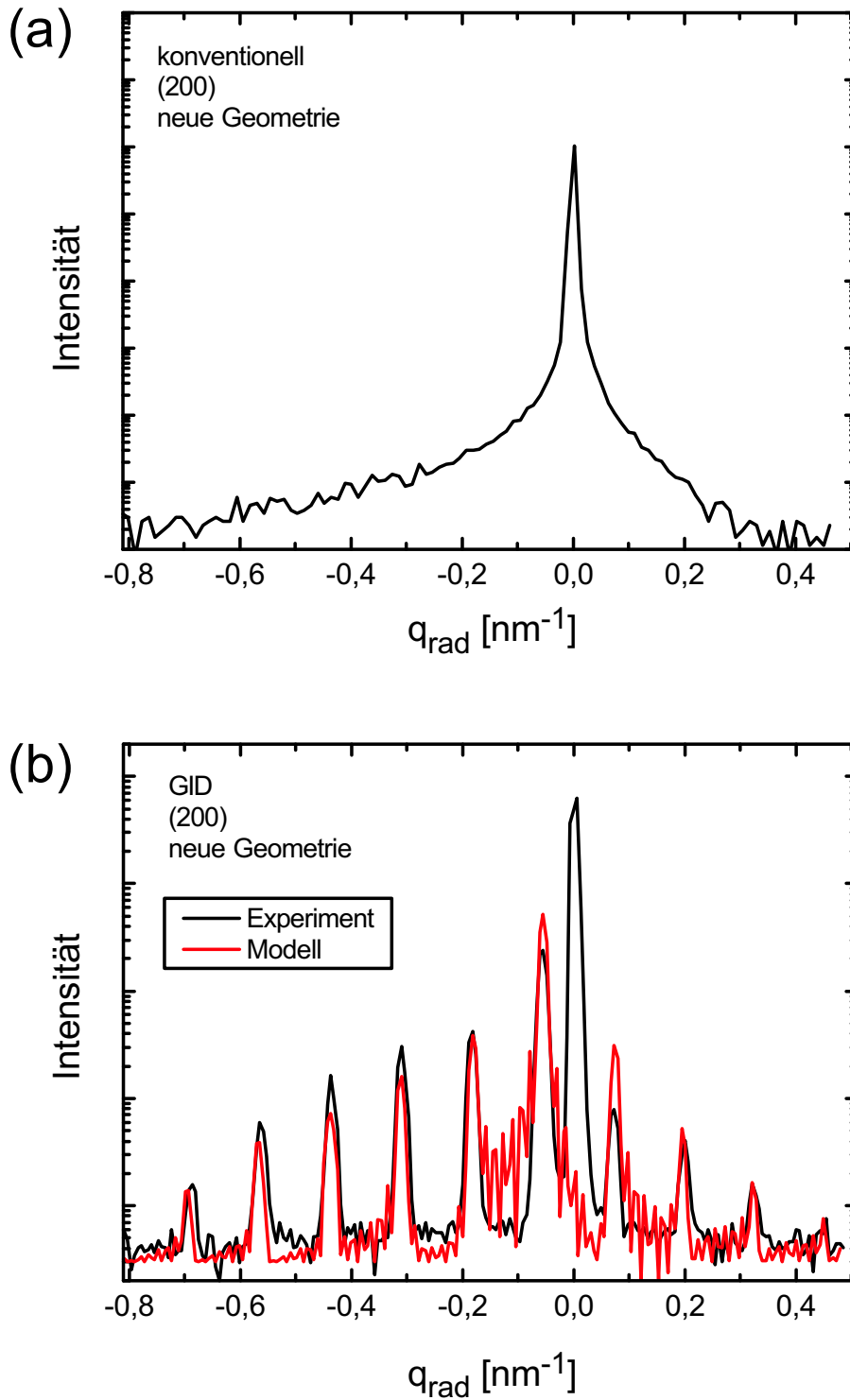


Abbildung 59: Konventionelle Röntgenbeugung (a) und GID-Spektrum (b) am (200)-Reflex für die neue Messgeometrie. Die Satellitenmaxima in (b) sind nun deutlich ausgeprägter und können gut mit einem Modell beschrieben werden [Szt03, Szt04]. Mit den Aufnahmen wird noch einmal bestätigt, dass die überwachsene Schicht in [100]-Richtung Gitterkonstantenmodulationen aufweist.

Klar ist zu erkennen, dass die GID-Oszillationen nun viel ausgeprägter sind. Mit dieser Aufnahme wird das Vorhandensein von Gitterkonstantenmodulationen in der CEO-Schicht noch einmal bestätigt.

Aus der Lage des Maximums der Einhüllenden der Satellitenmaxima kann die durchschnittliche Restverspannung in [100]-Richtung im modulierten Volumen bestimmt werden [Hol99, Uly99]. Der experimentelle Wert von $8(\pm 1) \cdot 10^{-3}$ ist dabei größer als das Simulationsergebnis von $5 \cdot 10^{-3}$, das mit **nextnano**³ erhalten wurde. Zum Teil lässt sich dieser Unterschied verstehen, wenn man annimmt, dass der gewählte streifende Einfallswinkel vorwiegend die am stärksten verspannte Region nahe der $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}/\text{GaAs}$ -Grenzfläche untersucht.

Die gut ausgeprägten Satellitenmaxima erlauben eine quantitative Beschreibung der Versuchsergebnisse. So gibt die rote Kurve in Abbildung 59(b) den Verlauf wieder, der mit Hilfe eines kinematischen Modells berechnet wurde. Den Ausgangspunkt dieser von Michael Sztucki durchgeführten Simulationen stellte die Berechnung des Verzerrungsprofils mit Hilfe eines kommerziellen Programms dar [Szt04]. Die Resultate entsprechen denen von **nextnano**³ (vergleiche Kapitel 3.4). Das zur Berechnung der Beugungsintensitäten benutzte Modell beruht auf einer Näherung mit einer linearen Kette aus Gallium- und Arsen-Atomen. Die nominellen Schichtdicken und das simulierte Verzerrungsprofil dienen als anfängliche Eingabeparameter für die Modellierung. Innerhalb des rekursiven Prozesses variiert man die Schichtdicken der $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ - und $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Lagen sowie den Gitterkonstantenverlauf in [011]-Richtung so lange, bis eine möglichst gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen vorliegt. Der GaAs-Braggreflex der unverspannten Region wurde nicht in die Simulationen mit eingeschlossen.

Aus der optimalen Anpassung ergab sich ein Verlauf der GaAs-Gitterkonstante in [011]-Richtung, bei dem die Komponente ε_{xx} des Verzerrungstensors von $10 \cdot 10^{-3}$ direkt an der Spaltfläche auf $0,7 \cdot 10^{-3}$ am Probenrand abfällt. Bei Simulationen mit **nextnano**³ nimmt ε_{xx} von $8,0 \cdot 10^{-3}$ auf $2,4 \cdot 10^{-3}$ ab und stimmt so nur in der Mitte der CEO-Lage gut mit der aus dem Experiment gewonnenen Anpassung überein. Weiterhin führt das Modell zu Breiten von 10,4 nm für die $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ -Lage und 38,6 nm für die $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barriere. Diese Werte sind mit den nominellen Schichtdicken in Einklang und reproduzieren die während der ersten Strahlzeit bestimmten Periodizitäten.

Insgesamt wurden in diesem Abschnitt Verspannungsmodulationen in der CEO-Lage nachgewiesen, die klar von denen des [100]-Übergitters unterscheidbar sind. Alle Periodizitäten und Schichtdicken stimmen gut mit den nominellen Werten überein.

6.4 Identifikation der Photolumineszenz-Signale

Nach den Experimenten mit Röntgenbeugung unter streifendem Einfall wird im Folgenden über die orts aufgelösten Photolumineszenz-Messungen berichtet. Die Beschreibung der untersuchten Probenstruktur ist in Abschnitt 6.1 zu finden. Wie schon bei der Diskussion des unverspannten Quantendrahts werden die Abhängigkeiten von den verschiedenen Parametern behandelt, wobei hier auf leistungsabhängige Messungen verzichtet wurde.

Die Durchführung mehrerer Flächenraasterungen diente dazu, mögliche Quantendrahtzustände nachzuweisen, die auf Verspannungen basieren. Dabei ist die Vorgehensweise so, wie in Kapitel 5.2 beschrieben, d. h. es wurde wieder die $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche der Probe abgerastert. Abbildung 60(a) zeigt die Intensitätsverteilung für die eingetragene Photonen-Energie von 1556,8 meV, die im Spektrum (b) mit einem Pfeil markiert ist. Die Pixelgröße von $100 \times 100 \text{ nm}^2$ in Teilbild (a) entspricht der gewählten Schrittweite. Während die horizontale weiße Linie die Lage des überwachsenen Quantenfilms angibt, kennzeichnen die vertikalen Linien die Grenzen des $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}/\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Übergitters. Das Signal, dessen farbkodierte Auftragung entlang der $[100]$ -Richtung orientiert ist, kann auf einer Länge von etwa $2 \mu\text{m}$ beobachtet werden. Die Tatsache, dass eine Differenz von ca. $0,5 \mu\text{m}$ zur Gesamtschichtdicke des $[100]$ -Übergitters be-

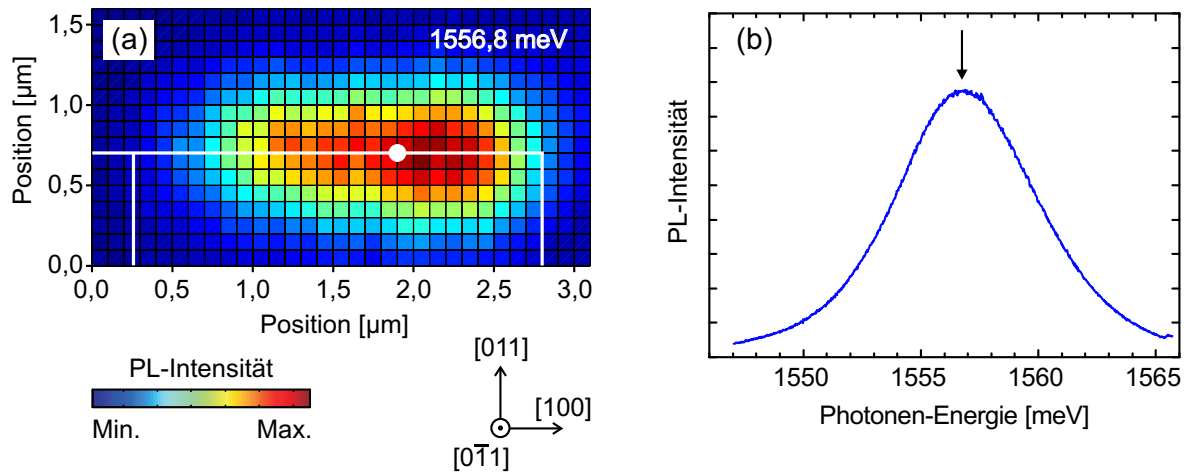


Abbildung 60: Die räumliche Intensitätsverteilung (a) für die eingetragene, in (b) mit einem Pfeil markierte Energie korrespondiert mit dem Bereich der verspannten Kreuzungen. Das Spektrum (b) wurde an dem mit einer weißen Kreisscheibe gekennzeichneten Probenort mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 60 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1589,6 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [100]$; $T = 6,0 \text{ K}$.

steht, weist wieder auf ein effektives Abfließen der Ladungsträger in das benachbarte Substrat hin. Das Signal selbst kann man in Abbildung 60(b) sehen. Es wurde an der Stelle aufgenommen, die in (a) mit einer weißen Kreisscheibe markiert ist (das zugehörige Pixel befindet sich rechts oberhalb der Markierung). Das spektrale Maximum liegt bei 1556,8 meV, während die FWHM-Linienbreite 7,3 meV beträgt.

Allerdings ist noch unklar, ob es sich hier um die Emission aus dem GaAs-Quantenfilm oder aus einer Vielzahl von Quantendrähten handelt. Für beide Möglichkeiten sollen im Folgenden einige Argumente gesammelt werden. Zunächst ist jedoch anzumerken, dass die Probenstruktur für die Röntgenmessungen optimiert wurde. Aus diesem Grund gibt es keinen zusätzlichen GaAs-Quantenfilm mit (100)-Orientierung und auch keine Referenzbarriere. Letztere würde die Detektion eines Signals aus einem Bereich des (011)-Quantenfilms ermöglichen, der neben den T-Kreuzungen liegt. Eine solche Probenstruktur wird in Kapitel 7 behandelt. Da in jenem Fall die Breite des GaAs-Quantenfilms ebenfalls nominell 7 nm beträgt, kann diese Probe zum Vergleich herangezogen werden. Das Maximum des Photolumineszenz-Spektrums liegt dort bei 1565 meV. Somit weist das in Abbildung 60(b) gezeigte Signal eine Rotverschiebung von 8,2 meV auf. Dies ist ein Indiz dafür, dass es sich tatsächlich um die Überlagerung der PL-Signale vieler verspannter Quantendrähte handelt.

Andererseits können auch Abweichungen von den nominellen Dicken zu unterschiedlichen spektralen Lagen der PL-Emission führen. Die Linienform wiederum liefert ein weiteres Argument für die verspannungsinduzierten Quantendrähte. Diese zeichnen sich – wie später gezeigt wird – durch glatte Photolumineszenz-Spektren aus. Eine derartige Linienform ohne charakteristische Spitzen ist auch in Abbildung 60(b) zu erkennen. Es bleibt anzumerken, dass bei Vorhandensein von Quantendrahtzuständen das Quantenfilmsignal durchaus bis zur Nichtdetektierbarkeit unterdrückt werden kann (vergleiche Abbildung 70 in Kapitel 7.3). Grund hierfür wäre das Abfließen der Ladungsträger vom Quantenfilm in die Quantendrähte, die ja nur einen Abstand von 40 nm haben und deshalb attraktive Energiesenken darstellen.

Bei den Mikro-Photolumineszenz-Messungen wurde ein weiteres Signal detektiert, das dem 300 nm breiten [011]-Übergitter zugeordnet werden kann. Die 30 je 2 nm breiten GaAs-Lagen stellen sehr schmale Quantenfilme dar. Deshalb wird eine PL-Emission bei relativ hohen Energien erwartet. Ein derartiges Photolumineszenz-Spektrum mit einem Intensitätsmaximum bei einer Photonen-Energie von 1711 meV ist in Abbildung 61(b) zu sehen. Aufgrund der geringen Dicke fallen Monolagenfluktuationen stark ins Gewicht und resultieren zum einen in einer relativ großen FWHM-Linienbreite von etwa 22 meV. Zum anderen kommt es – wie in Kapitel 4.3 erläutert – zur Exziton-Lokalisierung. Man

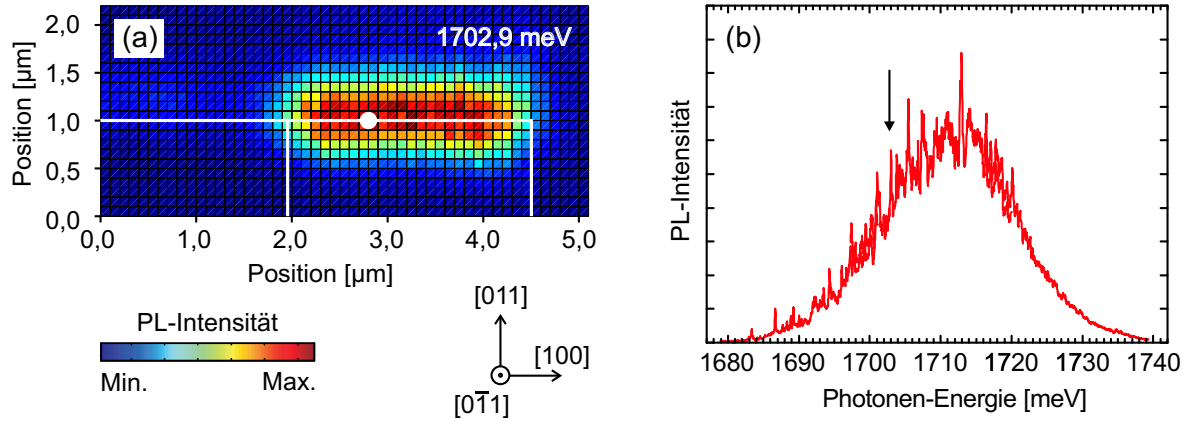


Abbildung 61: Die räumliche Intensitätsverteilung (a) des Signals, das von den (011)-Quantenfilmen des Übergitters emittiert wird, ist der Verteilung aus Abbildung 60(a) sehr ähnlich. Das Spektrum (b) zeigt jedoch scharfe Spitzen, die von lokalisierten Exzitonen herrühren. Die mit einem Pfeil markierte, in (a) eingetragene Energie bezieht sich auf die räumliche Intensitätsverteilung. Das Spektrum wurde an dem mit einer weißen Kreisscheibe gekennzeichneten Probenort mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 50 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1771,2 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [100]$; $T = 6,0 \text{ K}$.

kann deutlich erkennen, dass die scharfen Spitzen vorwiegend an der Niederenergieflanke auftreten.

Für die Photonen-Energie 1702,9 meV, die in (b) mit einem Pfeil gekennzeichnet ist, zeigt Abbildung 61(a) die Intensitätsverteilung der Quantenfilmsignale des Übergitters, die sich wenig von der des überwachsenen GaAs-Quantenfilms unterscheidet. Die Emission erstreckt sich über den gesamten Bereich des [100]-Übergitters, dessen Grenzen mit vertikalen Linien markiert sind. Interessant ist die Tatsache, dass die spektrale Lage des Signals vom Probenort abhängt, wie man in Abbildung 62 erkennen kann. Die hier zu sehenden Spektren gehören zu den Pixeln in Abbildung 61(a), die sich in der Reihe oberhalb der weißen Linie befinden. Für die Darstellung in Abbildung 62 wurde nur jedes zweite Spektrum verwendet, so dass die zugehörigen Probenorte in [100]-Richtung jeweils $0,2 \mu\text{m}$ voneinander entfernt sind.

Zunächst kann man sehen, dass im Bereich der $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ -Schichten die PL-Intensität am stärksten ist. Im Übergangsbereich zum Puffer verschwindet das Signal fast vollständig und ist auf der Höhe des Substrats schwächer als in der Region der Verspannungslagen. Während der Signaleinbruch im Zwischenbereich noch ungeklärt ist, weist der Intensitätsrückgang auf den Einfluss des Substrats (Abfließen der Ladungsträger) hin.

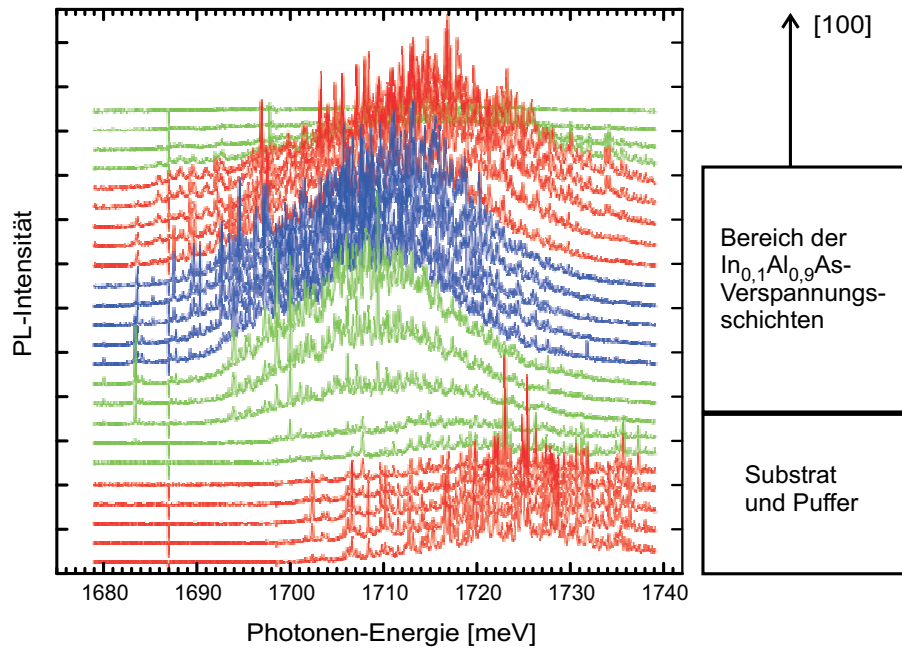


Abbildung 62: Die Spektren der Übergitter-Quantenfilme sind vertikal gegeneinander verschoben. Sie wurden entlang der $[100]$ -Richtung im Abstand von $0,2\,\mu\text{m}$ aufgenommen, so dass die farbigen Bereiche einer Länge von $1\,\mu\text{m}$ entsprechen. In der Region der $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ -Lagen ist die PL-Emission rotverschoben. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0\,\mu\text{W}$; $I = 2\,\text{s}$; $E_{\text{exc}} = 1771,2\,\text{meV}$; $PD1 = PD2 = [100]$; $T = 6,7\,\text{K}$.

Abbildung 62 zeigt auch, dass das Signal in der Region der T-Kreuzungen um etwa $10\,\text{meV}$ gegenüber dem Substrat-/Pufferbereich rotverschoben ist. Diese Energieverschiebung liefert den Nachweis, dass die im ersten Wachstumsschritt eingebauten Verspannungsschichten auch in Entfernungen von 37 bis $337\,\text{nm}$ von der Spaltkante (Lage des $[011]$ -Übergitters) einen Einfluss auf die PL-Emission haben. Die Frage nach Quantendrähten, die durch Verspannungsmodulationen gebildet werden, kann an dieser Stelle noch nicht geklärt werden. Abschnitt 7.3 wird jedoch zeigen, dass in einer Entfernung von $40\,\text{nm}$ von der Spaltkante die Verspannungsmodulationen noch nicht vollständig in eine mittlere Restverspannung übergegangen sind.

6.5 Polarisationsabhängige Messungen

Die Polarisationsabhängigkeit der PL-Signale wurde in einer weiteren Messreihe untersucht. So entstanden durch die Aufnahme von Photolumineszenz-Spektren für unterschiedliche Stellungen des Polarisationsdrehers PD2 (vergleiche Abbildung 32 auf Sei-

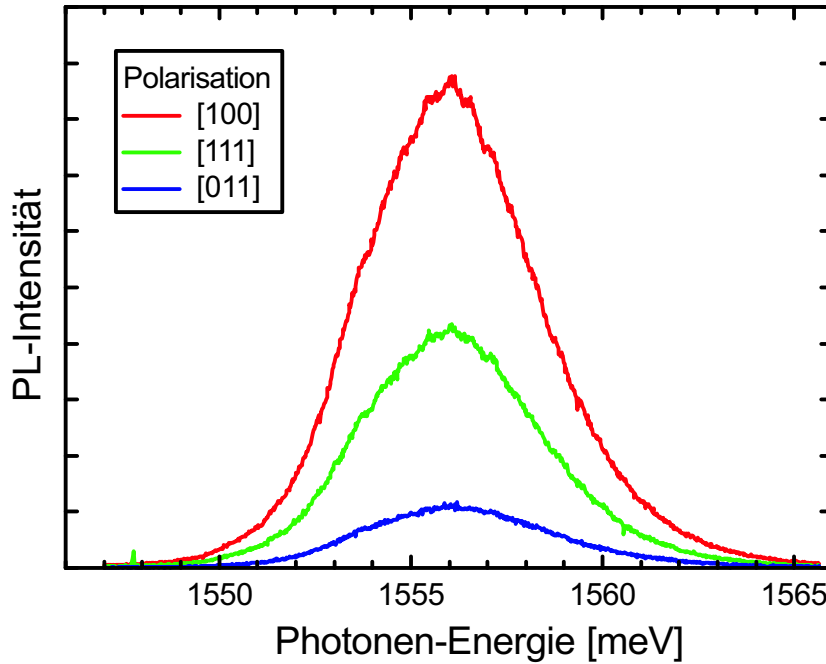


Abbildung 63: Detektierte PL-Intensität im Zentrum der Region der verspannten Kreuzungen. Auch wenn die Komponente senkrecht zum Quantenfilm nicht vollständig unterdrückt ist, liegt doch hauptsächlich eine Polarisation in $[100]$ -Richtung vor. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 20 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1593,6 \text{ meV}$; $PD1 = [100]$; $T = 4,2 \text{ K}$.

te 72) die im Folgenden abgebildeten Graphen. Es wurde stets mit $[100]$ -Polarisation angeregt (parallel zum Schnitt des überwachsenen (011) -Quantenfilms mit der $(0\bar{1}1)$ -orientierten Probenoberfläche), nachdem sich herausstellte, dass die Polarisationsrichtung des Lasers keinen messbaren Einfluss auf die Stärke der PL-Emission hatte.

In Abbildung 63 kann man sehen, wie die Intensität abnimmt, wenn die untersuchte Polarisationsrichtung in der $(0\bar{1}1)$ -Ebene von $[100]$ nach $[011]$ gedreht wird. Offensichtlich weist das emittierte Licht vorwiegend eine Polarisation parallel zum Quantenfilm auf. Das Verhältnis zum senkrechten Anteil beträgt 7,5:1 und ist damit kleiner als für den überwachsenen Quantenfilm im unverspannten Fall (12:1, vergleiche Abbildung 44 auf Seite 89). Die Tatsache, dass der unverspannte Quantendraht in Kapitel 5.3 hauptsächlich eine $[011]$ -Polarisation zeigte, ist ein Indiz gegen das Vorhandensein von Quantendrahtzuständen in der vorliegenden Struktur. Jedoch muss beachtet werden, dass verspannte Systeme durchaus veränderte Polarisations Eigenschaften aufweisen können.

Für die polarisationsabhängigen Messungen des Übergittersignals wurde die Wellenlänge des Anregungslasers auf 700 nm eingestellt (entsprechend einer Photonen-Energie

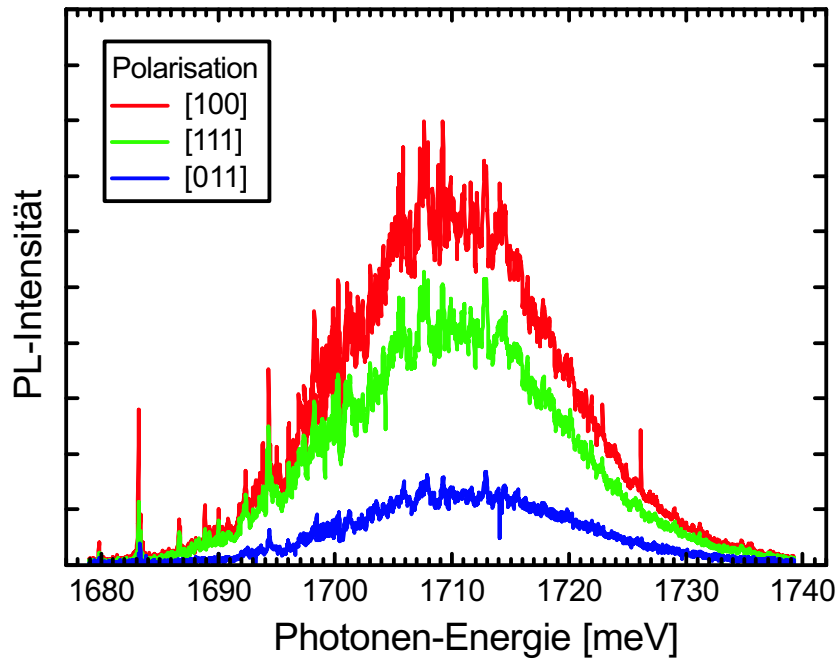


Abbildung 64: Detektierte PL-Intensität der (011)-Quantenfilme des Übergitters in Abhängigkeit von der Polarisationsrichtung. Wie beim überwachsenen Quantenfilm ist das Signal auch hier vorwiegend in [100]-Richtung polarisiert. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern im Zentrum der Region der Kreuzungen aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 32 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1771,2 \text{ meV}$; $PD1 = [100]$; $T = 6,0 \text{ K}$.

von $1771,2 \text{ meV}$). Bedingt durch die spektrale Breite der PL-Emission sind die in Abbildung 64 dargestellten Spektren aus je drei Teilaufnahmen zusammengesetzt. Man kann erkennen, dass auch hier eine überwiegende Polarisation in [100]-Richtung vorliegt. Der Quotient der Maximalintensitäten von [100]- und [011]-polarisiertem Signal beträgt etwa 7:1 und stimmt gut mit dem Verhältnis von zuvor überein.

6.6 Temperaturabhängige Messungen

Da das Ausdehnen des Kühlfingers mit steigender Temperatur – wie bereits erwähnt – zu einer Verschiebung der Probe führt, sind temperaturabhängige Messungen relativ aufwändig. Aus diesem Grund wurde nur eine Messreihe für das Signal bei $1556,8 \text{ meV}$ (siehe Abbildung 60) aufgenommen. Die Resultate dieser Untersuchung sind in Abbildung 65(a) zusammengefasst. Man kann erkennen, dass die Signalintensität mit steigender Temperatur kleiner wird, was auf die zunehmende Dominanz nichtstrahlender Rekombinationskanäle aufgrund einer erhöhten Wechselwirkung der Ladungsträger mit Phononen zurückgeführt werden kann.

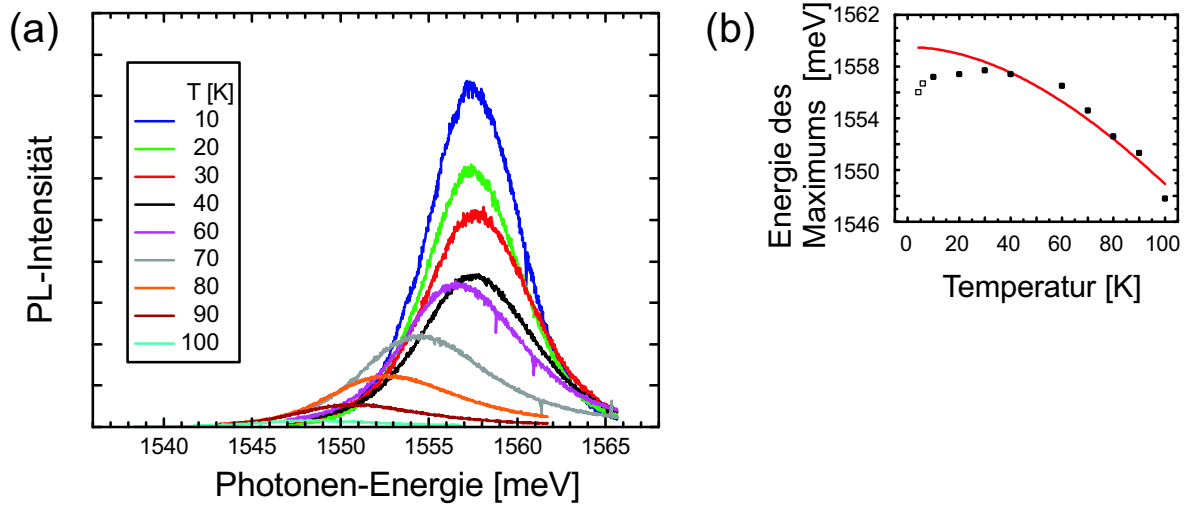


Abbildung 65: (a) Die PL-Signale im Zentrum der verspannten T-Kreuzungen zeigen mit zunehmenden Temperaturen eine Intensitätsabnahme. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 5\text{-}35 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1593,6 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [100]$. (b) Die Lage des Maximums verschiebt sich erst oberhalb von 30 K zu kleineren Energien. Offene Symbole beziehen sich auf die Spektren einer weiteren Messreihe, die in (a) nicht eingetragen sind. Die rote Kurve gibt den berechneten Verlauf wieder.

In Abbildung 65(b) ist die Verschiebung der energetischen Position des Maximums mit der Temperatur dargestellt. Die Datenpunkte zu den Temperaturen $4,2$ und 6 K stammen aus einer anderen Messreihe. Bis zu einer Temperatur von 30 K ist eine Blauverschiebung zu beobachten.

Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten basiert darauf, dass man hier das Signal von Quantendrähten detektiert. Wie schon beim unverspannten Quantendraht in Abschnitt 5.4 würde es dann mit steigender Temperatur zu einem Übergang von einer Blau- zu einer Rotverschiebung kommen, weil lokalisierte Exzitonen zunehmend aus den natürlichen Quantenpunkten angeregt werden. Das Fehlen der scharfen Spitzen im Spektrum wird mit der Mittelung über das Quantendrahtensemble erklärt. Wegen der anfänglichen Blauverschiebung liefert die Formel (48) auf Seite 92 nur eine grobe Näherung. Für die Parameter ergeben sich in diesem Fall folgende Werte (vergleiche [Ada94]):

$$E(0) = 1559,5 \text{ meV}, \quad \alpha = 0,45 \frac{\text{meV}}{\text{K}} \quad \text{und} \quad \beta = 325 \text{ K}.$$

6.7 Zusammenfassung

Alle in diesem Abschnitt vorgestellten Experimente wurden an Proben mit 50 verspannten T-Kreuzungen durchgeführt. Die vergleichsweise einfache Struktur mit nahe aneinander liegenden Verspannungsschichten ermöglichte Röntgenmessungen, erschwerte jedoch die einwandfreie Zuordnung der PL-Signale zu den Quantenstrukturen.

Im Einzelnen konnten durch Röntgenbeugung unter streifendem Einfall Verspannungsmodulationen in der CEO-Lage nachgewiesen werden. Dazu wurden radiale und angulare Aufnahmen sowohl am (200)- als auch am (0 $\bar{2}2$)-Reflex durchgeführt. Zusätzlich ergaben sich für alle Schichtdicken und Periodizitäten die erwarteten Werte.

Die Mikro-Photolumineszenz-Messungen lieferten einige Indizien dafür, dass die eingebauten Verspannungsmodulationen die Ausbildung von Quantendrahtzuständen bewirken. So weisen die spektrale Lage, die Linienform und die Temperaturabhängigkeit des Signals auf verspannte Quantendrähte hin. Andererseits lassen die polarisationsabhängigen Messungen keine eindeutigen Rückschlüsse auf das Vorliegen von Quantendrahtzuständen zu. Des Weiteren machte die Variation des Übergittersignals mit dem Probenort deutlich, dass die eingebauten Verspannungen die CEO-Lage nicht nur in unmittelbarer Nähe der Spaltfläche, sondern auch mehrere zehn Nanometer von ihr entfernt beeinflussen.

7 Verspannungsinduzierte Einfach-Quantendrähte

Das zentrale Anliegen dieses Kapitels ist der Nachweis einzelner, verspannungsinduzierter Quantendrähte mit hohen Einschlussenergien. Dazu werden verspannte Systeme studiert, bei denen der Abstand zwischen den Verzerrungsschichten groß genug ist, um eine individuelle räumliche Detektion des PL-Signals zu erlauben. Die spezifischen Eigenschaften der Quantendrähte folgen mit dem Hintergrund der vorangegangenen Abschnitte aus den polarisations-, temperatur- und leistungsabhängigen Messungen (siehe auch [Sch04c, Sch04d]).

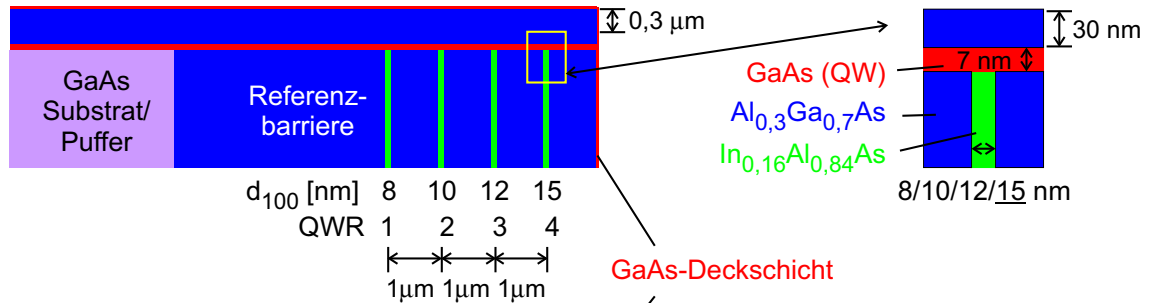
7.1 Probenaufbau

Die in diesem Kapitel behandelten Strukturen (Identifikationsnummern 04.14.00.1a(r) und 12.20.02e(lr)) wurden erneut mit Hilfe des CEO-Verfahrens hergestellt. In Probe A, die in Abbildung 66 oben skizziert ist, schließt sich an den 100 nm breiten GaAs-Puffer eine $4\text{ }\mu\text{m}$ dicke $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Referenzbarriere an. Damit kann beim überwachsenen Quantenfilm die Photolumineszenz aus einem unverspannten Bereich detektiert werden.

Auf die Referenzbarriere folgen vier Sequenzen aus einer Verspannungsschicht mit einem nominellen Indium-Gehalt von 20 % und einer $1\text{ }\mu\text{m}$ breiten $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barriere. In diesem Abschnitt wird ein realer Indium-Gehalt von 16 % verwendet, der mit Röntgenuntersuchungen ermittelt wurde. Die Dicken d_{100} der verspannten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen variieren innerhalb der Struktur systematisch (8, 10, 12 und 15 nm). Die trennenden $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Schichten sind breiter als der Durchmesser des Detektionsfokus. So ermöglicht der Mikro-Photolumineszenz-Aufbau zusammen mit der CEO-Methode ohne zusätzliche Eingriffe das individuelle Abrastern einzelner T-förmiger Kreuzungen, an denen man Quantendrähte (QWR1 bis QWR4, engl.: quantum wire) erwartet. Der erste Wachstumsschritt wurde durch eine 10 nm dicke GaAs-Deckschicht komplettiert, die eine Oxidation der aluminiumhaltigen Schichten verhindern soll.

Nach dem Freilegen einer (011)-Fläche wurden ein GaAs-Quantenfilm (QW, engl.: quantum well) der Breite $d_{011} = 7\text{ nm}$, eine 30 nm dicke $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barriere und ein $0,3\text{ }\mu\text{m}$ breites Übergitter gewachsen. Letzteres setzt sich aus abwechselnden Lagen aus GaAs (2 nm) und aus $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ (8 nm) zusammen und dient bei den Flächenrasterungen dazu, einen ausreichenden Abstand zwischen den T-förmigen Kreuzungen und dem Probenrand sicherzustellen. Eine 10 nm breite GaAs-Deckschicht schließt diesen Wachstumsschritt ab.

Probe A



Probe B

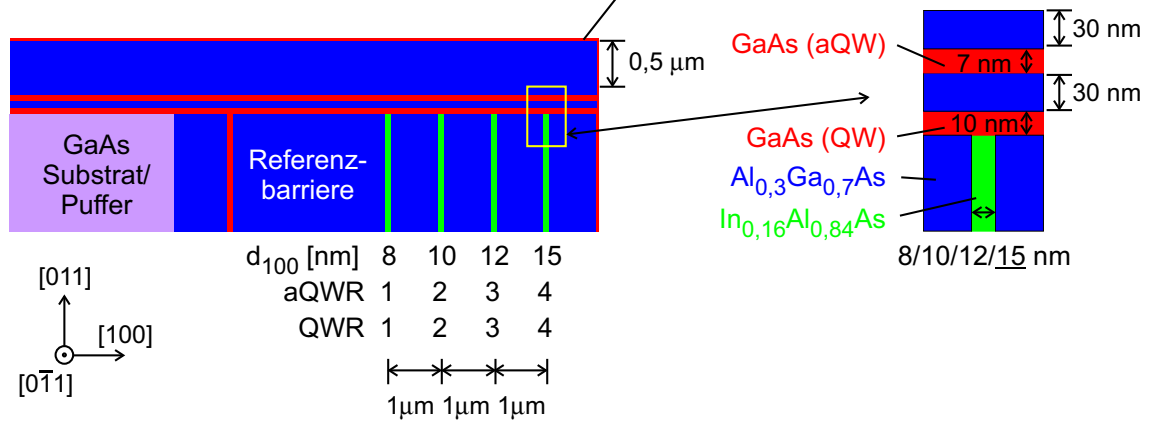


Abbildung 66: Schema der Strukturen mit verspannten Einfach-Quantendrähten. In beiden Proben gibt es vier separate Verspannungslagen unterschiedlicher Schichtdicke.

Die in Abbildung 66 unten dargestellte Probe B unterscheidet sich in folgenden Punkten von der obigen: Erstens wurden alle Al_{0.3}Ga_{0.7}As-Barrieren des [100]-Wachstumsschritts durch GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As-Übergitter (2 nm/8 nm) ersetzt, mit welchen man bei mikrometerdickem Wachstum eine bessere Probenqualität erhält. Zweitens wurde innerhalb der Referenzbarriere 1 μm nach dem Puffer ein 7 nm breiter (100)-Quantenfilm aus GaAs eingefügt. Dieser diente unter anderem bei den polarisationsabhängigen Messungen zur Kontrolle der Orientierung und wird hier nicht weiter diskutiert.

Im zweiten Wachstumsschritt betrug die Dicke des überwachsenen (011)-Quantenfilms (QW) in diesem Fall $d_{011} = 10$ nm. Unmittelbar an die 30 nm breite Al_{0.3}Ga_{0.7}As-Barriere anschließend gibt es einen weiteren Quantenfilm (7 nm), auf den wieder eine Barriere aus Al_{0.3}Ga_{0.7}As (30 nm) folgt. Mit diesem zusätzlichen (011)-Quantenfilm (aQW, engl.: additional quantum well) soll getestet werden, ob die Verspannungsmodulationen auch 40 nm von der Spaltfläche entfernt zu weiteren Quantendrähten (aQWR1 bis aQWR4, engl.: additional quantum wire) führen. Das aQW-Signal kann zwar nicht räumlich, aufgrund der unterschiedlichen Quantenfilmbreiten jedoch spektral

von dem des Quantenfilms QW getrennt werden. Ein letzter, allerdings unerheblicher Unterschied zur Probe A besteht in der Dicke des [011]-Übergitters, das hier $0,5\,\mu\text{m}$ breit ist.

7.2 Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen

Eine schnelle Methode zur Visualisierung der gewachsenen Struktur bietet das Rasterkraftmikroskop (AFM, engl.: atomic force microscope), mit dem Höhenunterschiede von weniger als $1\,\text{nm}$ detektiert werden können [Bin86]. Um Querschnittsabbildungen von Heterostrukturen zu erzeugen, nutzt man aus, dass unterschiedliche Materialien in der gleichen Zeit verschieden starke Oxidationsschichten ausbilden. Die in dieser Arbeit vorgestellten AFM-Bilder wurden im Rahmen einer lehrstuhlinterne Zusammenarbeit von Elisabeth Reinwald aufgenommen.

Abbildung 67(a) zeigt einen $6 \times 6\,\mu\text{m}^2$ großen Bereich der $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche. Rechts kann man den Rand bzw. oben auch die Ecke der Probe erkennen. Das Bild wird dominiert von vier weißen Linien. Dies sind aber nicht die $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schichten. Vielmehr weist die Oberfläche an diesen Stellen Stufen mit Höhen von 67 , 18 , 7 und $13\,\text{nm}$ (von links nach rechts) auf, die *ex situ* beim Freilegen der $(0\bar{1}1)$ -Flächen entstanden sind. Auf die daraus folgenden Konsequenzen wird am Ende des Abschnitts eingegangen.

In Teilbild (b), das eine Vergrößerung des markierten Bereichs in (a) zeigt, sieht man eine weitere Linie, die die $8\,\text{nm}$ breite verspannte Schicht darstellt. Diese endet am Quantenfilm QW, der sehr schwach in Richtung des Pfeils zu erkennen ist. Die Höhe der Oxidationsschicht der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage ist mit rund $1\,\text{nm}$ um mehr als einen Faktor 10 kleiner als die Höhe der Stufe, die im Bild als weiße Doppellinie erscheint. Um die Verspannungsschichten trotzdem gut erkennen zu können, zeigen alle Teilbilder von Abbildung 67 nicht das farbkodierte Höhenprofil, sondern dessen Ableitung.

Analog sieht man im Bereich (c) die $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage ($d_{100} = 10\,\text{nm}$) und daneben die Stufe. Die Orientierung des Bilds unter 45° erlaubt – wie schon in (b) – den Quantenfilm QW zu erkennen. Dies ist aufgrund der Rasterrichtung nicht möglich, wenn er wie in (a) horizontal liegt, da bei den AFM-Aufnahmen jeder Zeilenmittelwert auf null normiert wird. Im Gegensatz zu oben ist die dritte und vierte $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schicht ($d_{100} = 12/15\,\text{nm}$) in den Regionen (d) und (e) nicht zu sehen. (Die zwei benachbarten, dunklen Linien in (e) liegen zu weit von der erwarteten Position entfernt.) Es ist davon auszugehen, dass die Verspannungsschicht hier jeweils mit der Stufe zusammenfällt. Der gelb gekennzeichnete horizontale Versatz oben in Teilbild (d) war nötig, um ein

Probe A

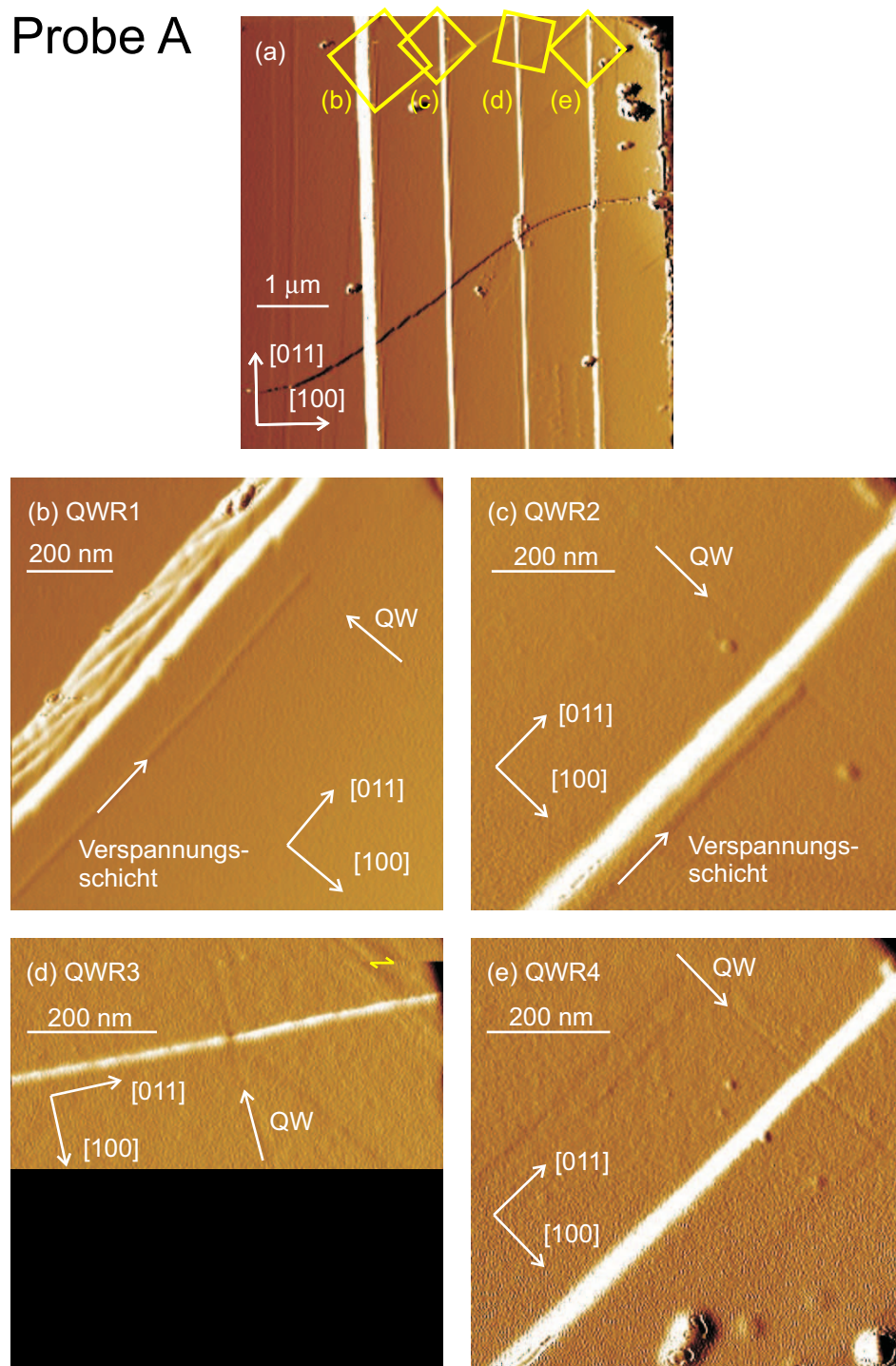


Abbildung 67: AFM-Aufnahmen (Ableitung der Höheninformation) der $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche von Probe A über einen Rasterbereich von $6 \times 6 \mu\text{m}^2$. Die weißen Linien in der Übersicht (a) sind Stufen mit Höhen zwischen 7 und 67 nm. Parallel zu diesen liegen die Verspannungsschichten, wie die Vergrößerungen (b) und (c) zeigen. In (d) und (e) sind nur die Stufen, aber keine $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen erkennbar.

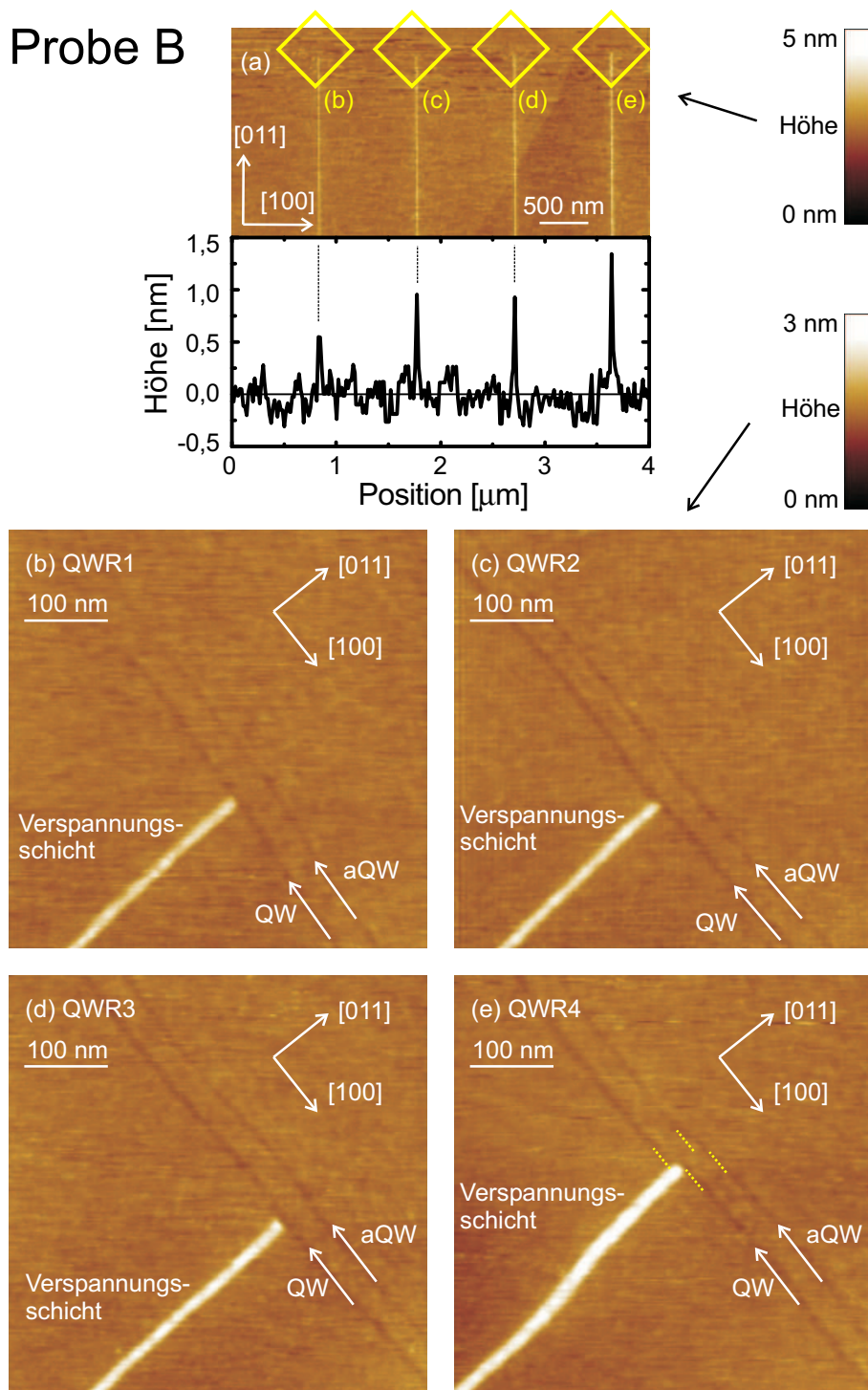


Abbildung 68: AFM-Aufnahmen (Höheninformation) der $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche von Probe B über einen Rasterbereich von $4 \times 2 \mu\text{m}^2$. Sowohl in der Übersicht (a) als auch in den Vergrößerungen (b) bis (e) treten die $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schichten als weiße Linien hervor. Die Höhe der Oxidationsschicht nimmt mit der Dicke der Verspannungslagen zu. In (e) weisen QW und aQW an der Kreuzung mit der Verspannungsschicht einen Versatz auf.

zu weites Verfahren der Mikroskopspitze über den Probenrand hinaus zu vermeiden. Zudem wurde der untere Teil des Bilds geschwärzt, da hier viele Störungen auftraten, während man in Teilbild (e) nur einzelne Partikel auf der Probenoberfläche sieht.

Für Probe B zeigt Abbildung 68(a) ein $4 \times 2 \mu\text{m}^2$ großes farbkodiertes Bild des Höhenprofils der $(0\bar{1}1)$ -Fläche. In diesem Fall stellen die weißen Linien die vier Verspannungsschichten dar. Aus dem aufgetragenen Querschnitt durch das Höhenprofil geht hervor, dass die Oxidationsschicht der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen nach mehreren Stunden etwa 1 nm dick ist. Bei dieser Probe sind keine Stufen zu beobachten. In den um 45° gedrehten Teilbildern (b) bis (e) kann man die T-Kreuzungen der 8, 10, 12 und 15 nm breiten Verspannungslage mit dem QW sehen. Von diesem 30 nm entfernt, ist in allen Bildern auch der aQW klar zu erkennen. Die immer heller werdenden $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schichten in der Abfolge (b) bis (e) zeigen, dass mit zunehmender Breite der Verspannungslagen die Oxidationsschichten höher werden. Dies geht auch aus dem Querschnitt des Höhenprofils hervor. Im Übrigen bestätigen die AFM-Aufnahmen die nominellen Schichtdicken.

Alle in Probe A beobachteten Stufen sind parallel zu den Verspannungsschichten orientiert und liegen in unmittelbarer Nähe der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen. Demnach wirken die verspannten epitaktischen Schichten als Schwachstellen beim Spalten. Dies gilt auch für den *In-situ*-Spaltvorgang vor dem $[011]$ -Wachstum. Stufen, die dort entstehen, übertragen sich auf den überwachsenen Quantenfilm. AFM-Aufnahmen der $(0\bar{1}1)$ -Fläche zeigen den Quantenfilm dann als Linie, die an der Position der Stufe einen Sprung aufweist. Genau dieses Verhalten kann man in Abbildung 68(e) erkennen. Somit ist zu erwarten, dass in Probe B an der Kreuzung der 15 nm breiten Verspannungsschicht mit dem GaAs-Quantenfilm kein Quantendraht vorliegt.

7.3 Identifikation der Photolumineszenz-Signale

Im Folgenden wird die Kombination der hohen räumlichen und spektralen Auflösung des Mikro-Photolumineszenz-Messplatzes dazu verwendet, die detektierten Signale den verschiedenen Quantenstrukturen zuzuordnen.

Quantenfilme

Zunächst sind in Abbildung 69 drei Photolumineszenz-Spektren mit den zugehörigen Flächenraasterungen der $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche zu sehen. Das in (b) gezeigte Signal mit ei-

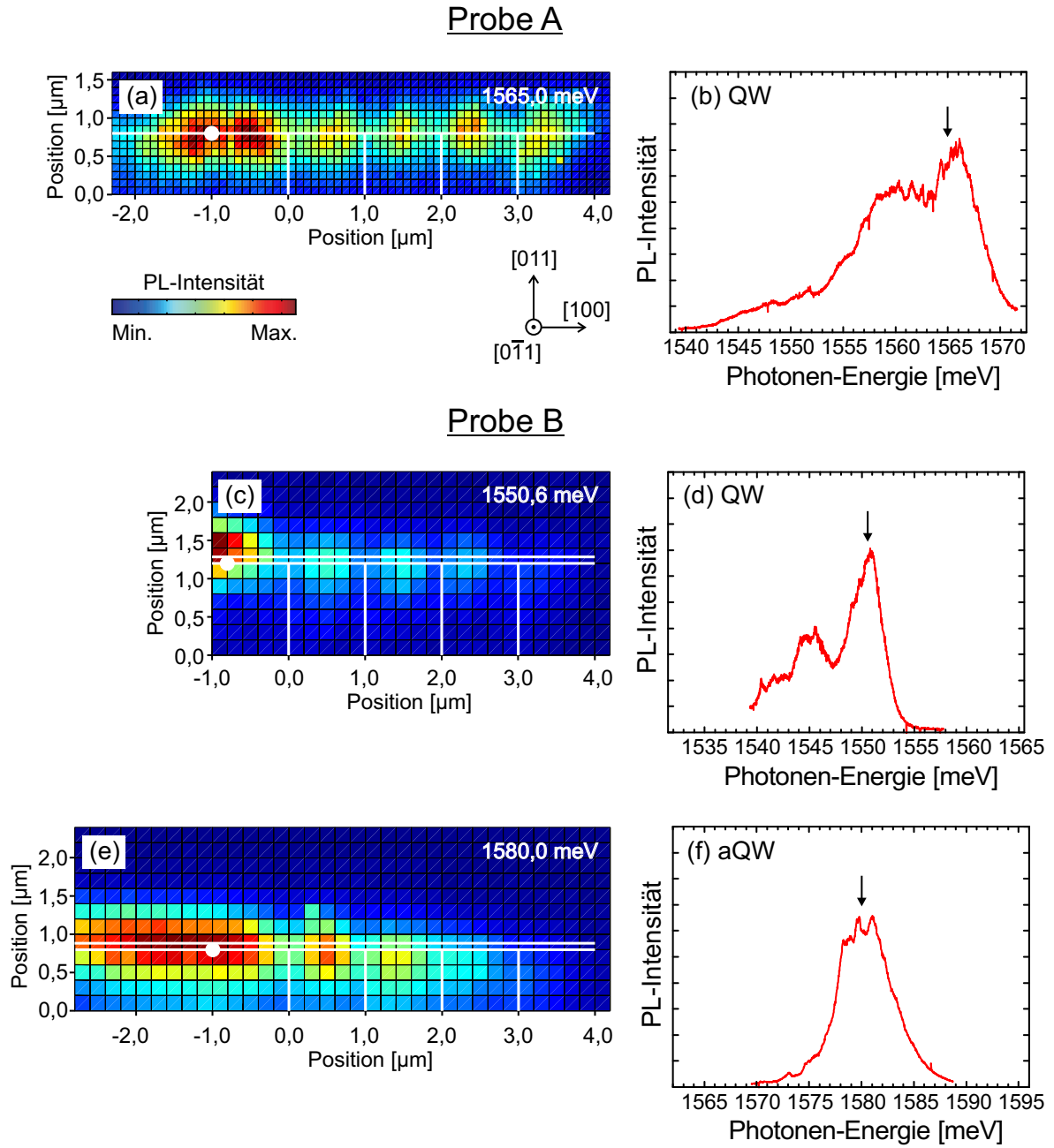


Abbildung 69: In der linken Spalte zeigen die räumlichen Intensitätsverteilungen aller Quantenfilme (QW Probe A, QW und aQW Probe B) Minima genau an den Stellen, an denen man Quantendrähte erwartet. Rechts kennzeichnen Pfeile die Energien, die in den Flächenrasterungen angegeben sind und deren Intensitätswerte dort farbkodiert dargestellt werden. Die Spektren wurden an den mit weißen Kreisscheiben markierten Probenorten mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 60 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1589,0/1585,1/1618,6 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [100]$; $T = 5,4/5,2/5,2 \text{ K}$.

ner Photonen-Energie um 1562 meV wird aufgrund der Intensitätsverteilung (a) der Emission des überwachsenen Quantenfilms zugeordnet. Es wurde in Struktur A in der Region der Referenzbarriere (horizontale Position $-1,0 \mu\text{m}$) aufgenommen und besitzt eine FWHM-Linienbreite von 12 meV. Das höherenergetische der beiden Hauptsignale, das die größere Intensität aufweist, ist um 1565 meV zentriert. Wie aus den temperaturabhängigen Messungen in Kapitel 7.5 hervorgeht, kann das niederenergetische Signal auf lokalisierte Zustände zurückgeführt werden, die auch für die scharfen Spitzen verantwortlich sind. Es zeigt bei der gewählten Anregungsleistung von $1,0 \mu\text{W}$ in der Nähe der verspannten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen eine stärkere Emission als das höherenergetische Signal (siehe Abbildung 80).

Wichtig ist, dass genau an den Stellen, an denen man die Emission aus Quantendrahtzuständen erwartet, die Intensität beider Signalspitzen reduziert ist. Diese Unterdrückung der QW-Emission kann man in Teilbild (a) in der farbkodierten Intensitätsverteilung des bei 1565,0 meV emittierten Photolumineszenz-Lichts sehen. Die Minima treten im Abstand von $1 \mu\text{m}$ auf. Gemäß der gewählten Schrittweite entspricht diese Entfernung zehn Pixeln. Generell kennzeichnen die vertikalen weißen Linien die Verspannungsschichten, während die horizontalen Linien mit den (011)-Quantenfilmen zusammenfallen. Die QW-Emission ist im Bereich der Referenzbarriere am stärksten. Sie kann nicht auf deren Gesamtlänge von $4 \mu\text{m}$ beobachtet werden, weil die Ladungsträger in das Substrat abfließen.

Darüber hinaus zeigt Abbildung 69 in den Teilbildern (c) bis (f) die Flächenrasterungen und Spektren für die beiden Quantenfilme von Probe B. Es gelten hier die analogen Anmerkungen von oben. Das QW-Signal mit Zentrum bei 1547 meV besitzt wieder zwei Spitzen. Die FWHM-Linienbreite der höherenergetischen Emission bei 1550 meV beträgt 4 meV. Hingegen sieht man beim aQW nur ein Signal bei 1580 meV mit einer FWHM-Linienbreite von 6 meV. Die beiden Intensitätsverteilungen wurden mit Schrittweiten von 200 nm gerastert. Sie zeigen für die in den Spektren markierten Energien erneut Minima an den Orten, an denen Quantendrähte erwartet werden. Jedoch sind beim QW nur drei und beim aQW nur zwei Stellen geringerer Intensität deutlich zu erkennen.

Quantendrähte

Im mittleren Teil von Abbildung 70 werden vier weitere Intensitätsverteilungen verschiedener Photonen-Energien präsentiert, wobei die Pixelgröße hier stets $100 \times 100 \text{ nm}^2$

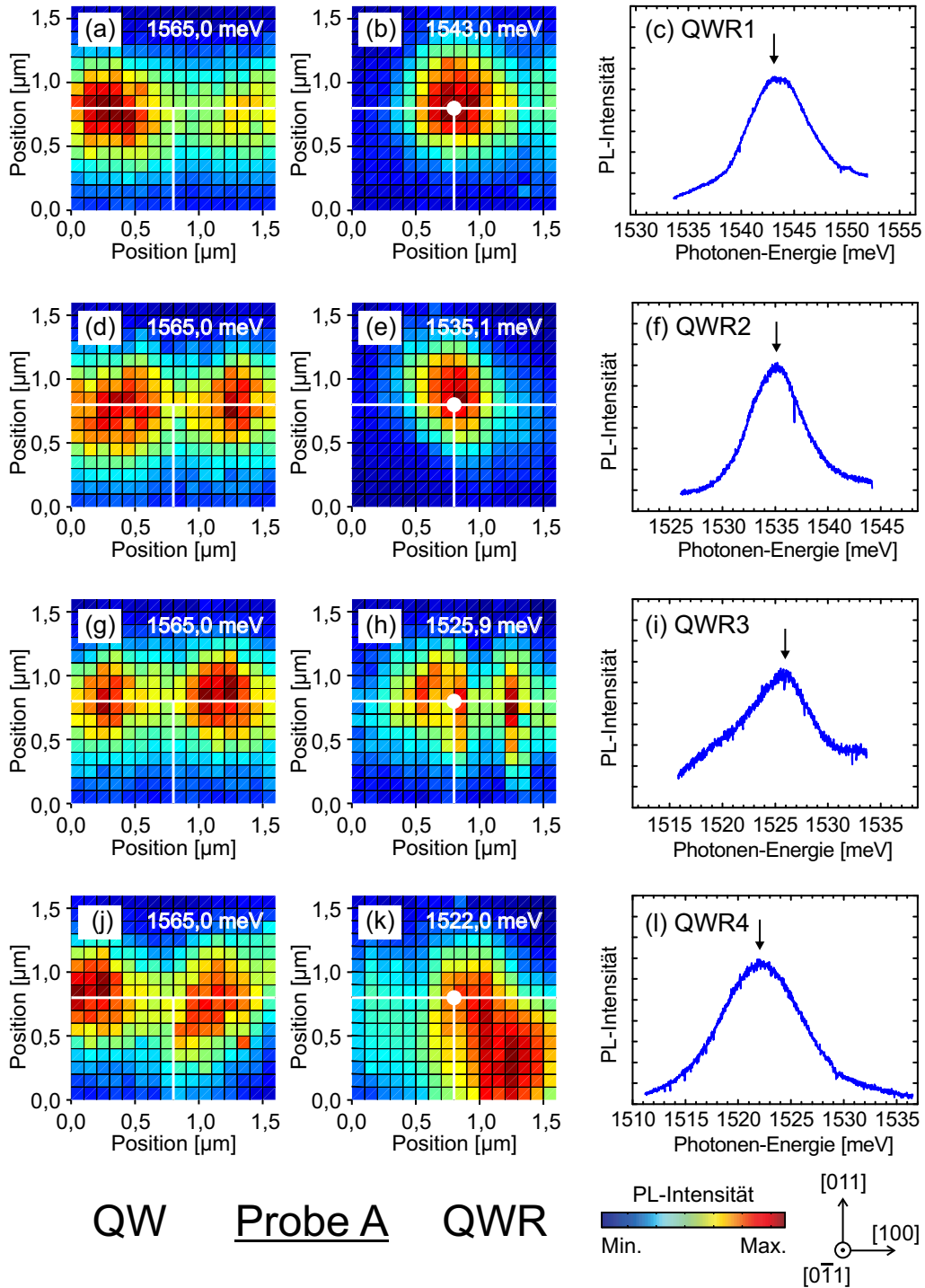


Abbildung 70: Alle Minima der QW-Emission (links) fallen mit Maxima der QWR-Emission (mittlere Spalte) zusammen. Die Intensitätsverteilungen der Quantendrahtsignale gehören zu den angegebenen und mit Pfeilen gekennzeichneten Energien. Die Spektren von QWR1 bis QWR4 (rechts von oben nach unten) wurden an den markierten T-Kreuzungen mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 60 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1589,0 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [011]$; $T = 5,3/5,0/5,2/5,1 \text{ K}$.

beträgt und die linke untere Ecke als neuer Koordinatenursprung gewählt wurde. Die vertikalen und horizontalen Linien kennzeichnen erneut die $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen und den GaAs-Quantenfilm.

An der T-förmigen Kreuzung der 8 nm und der 10 nm breiten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Schicht mit dem überwachsenen Quantenfilm werden lokale PL-Emissionen mit Photonen-Energien von 1543 und 1535 meV beobachtet. Innerhalb eines Radius, der im Wesentlichen durch die räumliche Auflösung des Aufbaus gegeben ist, fällt die Intensität jeweils auf den halben Maximalwert. Daraus kann man schließen, dass hier die Emission aus individuellen, rein durch Verspannung gebildeten Quantendrähten beobachtet wird. Da die Molekularstrahlepitaxie eine präzise Kontrolle der Schichtdicken erlaubt, sind die Abstände zwischen den Quantendrähten und zum Rand genau bekannt. So ist eine eindeutige Identifizierung einzelner Quantendrähte möglich.

In der linken Spalte von Abbildung 70 kann man noch einmal die QW-Emission am Ort der Quantendrähte sehen. Die Anwesenheit der eindimensionalen Zustände ist für die beobachtete lokale Intensitätsunterdrückung des QW-Signals verantwortlich, weil Ladungsträger aus dem Quantenfilm leicht zu den Quantendrähten gelangen können. Die Signale dieser Quantendrähte an den markierten Kreuzungen sind rechts wiedergegeben. Man erkennt, dass die Linienformen alle glatt sind. Diese Tatsache wird in Abschnitt 7.6 noch genauer diskutiert.

Die FWHM-Linienbreiten sind 8 meV für QWR1 (8 nm) und 7 meV für QWR2 (10 nm) und die Einschlussenergien bezüglich des QW-Hauptsignals betragen 22 meV (QWR1) und 30 meV (QWR2). Diese Werte werden von QWR3 (12 nm) und QWR4 (15 nm) übertroffen, die Photolumineszenz-Licht bei 1526 und 1522 meV emittieren, was Einschlussenergien von 39 und 43 meV entspricht. Die FWHM-Linienbreiten sind je 9 meV für QWR3 und QWR4. Jedoch erscheinen die räumlichen Intensitätsverteilungen (die angegebenen Energien sind wieder mit einem Pfeil im Spektrum markiert) nicht so lokal konzentriert wie bei QWR1 und QWR2. Eine mögliche Erklärung für diesen Effekt liefert die mikroskopische Struktur der abgerasterten $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche. Wie die AFM-Aufnahmen im vorherigen Kapitel zeigten, fallen für QWR3 und QWR4 die Verspannungsschichten mit 7 und 13 nm hohen Stufen zusammen. Dies könnte sowohl die eindimensionalen Zustände beeinflussen als auch für die beobachteten, räumlich weniger stark lokalisierten Intensitätsverteilungen verantwortlich sein.

In den Abbildungen 71 und 72 sind die entsprechenden Resultate für Probe B zusammengefasst, bei der die Breite des überwachsenen QW 10 nm und die des zusätzlichen aQW 7 nm beträgt. Jedoch konnten für den QW nur drei und für den aQW

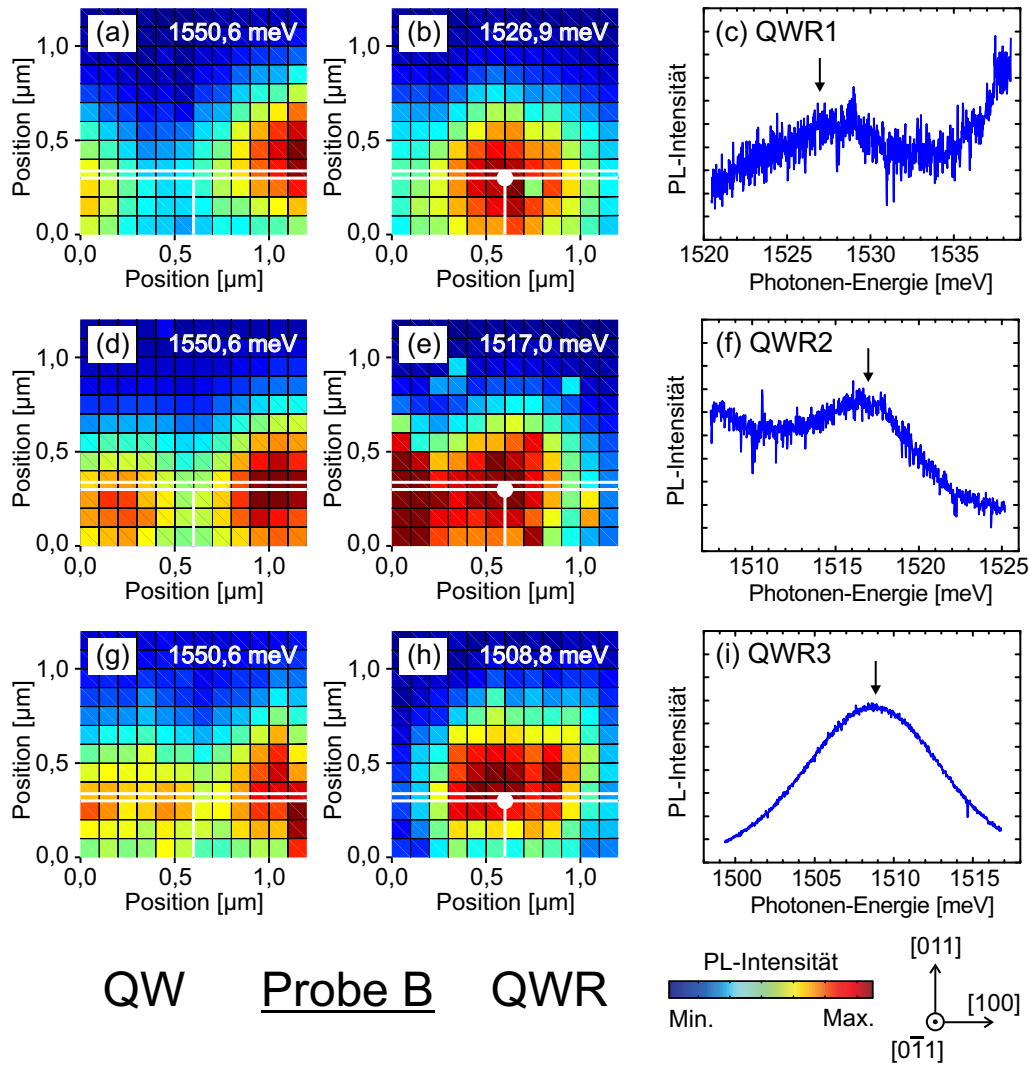


Abbildung 71: Alle Minima der QW-Emission (links) fallen mit den Maxima der QWR-Emission (mittlere Spalte) zusammen. Die Intensitätsverteilungen der Quantendrahtsignale gehören zu den angegebenen und mit Pfeilen gekennzeichneten Energien. Die Spektren von QWR1 bis QWR3 (rechts von oben nach unten) wurden an den markierten T-Kreuzungen mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 60 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1585,1 \text{ meV}$; $PD1 = PD2 = [011]$; $T = 5,3/4,9/4,9 \text{ K}$.

nur zwei der vier möglichen Quantendrahtsignale detektiert werden. Das beobachtete Verhalten an der Kreuzung der 15 nm breiten Verspannungsschicht mit dem GaAs-Quantenfilm ist mit Hilfe der AFM-Aufnahme in Abbildung 68(e) erklärbar. Aufgrund der dort gezeigten Stufe, die vom *In-situ*-Spaltvorgang vor dem [011]-Wachstum herührt, war für QWR4 und aQWR4 keine Quantendrahtemission zu erwarten. Außerdem können Versetzungen, die eingebaut werden, wenn die kritische Schichtdicke (vergleiche Seite 55) während des Wachstumsprozesses erreicht wird, die Quantendrahtbildung

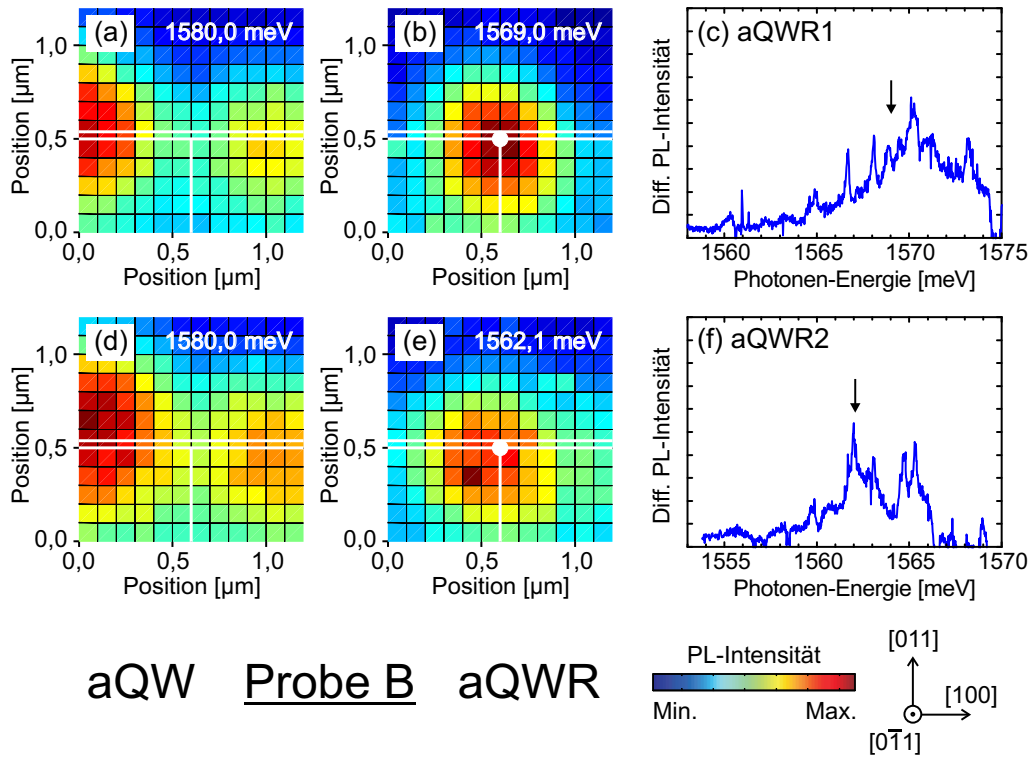


Abbildung 72: Die Quantendrähte werden über die Intensitätsverteilungen (links und in der Mitte) identifiziert. Diese gehören zu den angegebenen Energien, die für aQWR1 und aQWR2 zusätzlich rechts im Spektrum mit einem Pfeil markiert sind. Die PL-Emission der Quantendrähte ist nur sehr schwach in der Flanke des aQW-Signals zu erkennen. Deshalb sind in den Spektren die Differenzen der Signale aufgetragen („Diff. PL-Intensität“), die am Ort der Quantendrähte und $1\,\mu\text{m}$ links vom aQWR1 mit folgenden Parametern aufgenommen wurden: $P = 1,0\,\mu\text{W}$; $I = 60\,\text{s}$; $E_{\text{exc}} = 1618,6\,\text{meV}$; $PD1 = PD2 = [011]$; $T = 5,2/4,7\,\text{K}$.

verhindern. Unterstützt wird diese Erklärung durch die Tatsache, dass immer die Quantendrähte mit den dicksten Verspannungsschichten nicht detektierbar sind.

Mit Ausnahme von QWR3 sind die PL-Signale relativ schwach, was in der zusammenfassenden Abbildung 73 noch genauer zu sehen sein wird. Trotzdem weisen die korrespondierenden Intensitätsverteilungen an den erwarteten Stellen klare lokale Maxima in der PL-Intensität der Quantendrähte und entsprechende Minima in der QW-Emission auf, so dass man hier eindeutig auf Quantendrahtzustände schließen kann. Im Einzelnen liegen die spektralen Mitten der Signale von QWR1, QWR2 und QWR3 bei 1527, 1517 und 1509 meV mit FWHM-Linienbreiten von 10, 9 und 10 meV. Die Einschlussenergien betragen somit 23, 33 und 41 meV.

Die Intensität der zwei beobachtbaren zusätzlichen Quantendrähte ist so schwach, dass sie nur als kleine Änderung in der Schulter der aQW-Emission sichtbar wird. Abbildung 72 stellt die Signale bei 1569 und 1562 meV für aQWR1 und aQWR2 dar. In beiden Fällen wurde von den Spektren, die vom Ort der Quantendrähte stammen, das PL-Signal des aQW (1 μm links vom aQWR1 aufgenommen) subtrahiert. Eine Angabe der FWHM-Linienbreite ist nicht sinnvoll und für die Einschlussenergien ergeben sich Werte von 11 und 18 meV. Die in den Kurven der abgebildeten Differenzsignale auftretenden Spitzen sind der Niederenergieflanke des aQW zuzuordnen.

Trotz der sehr schwachen PL-Emission zeigen die Intensitätsverteilungen (b) und (e) ohne Differenzsignalberechnung eine klare lokale Einschränkung. Deshalb kann man aus den Daten schließen, dass die Verspannungsschichten auch 40 nm von der Spaltkante entfernt eine Quantendrahtbildung ermöglichen. Diese Erkenntnis stimmt mit den bereits auf Seite 41 dargelegten Resultaten von Gershoni *et al.* [Ger90] überein. Dort wurden Quantendrähte in Abständen von 22 und 50 nm von der Spaltfläche beobachtet.

Übersicht

Abbildung 73 fasst die bisherigen Ergebnisse zusammen. Die Teilbilder (a), (b) und (c) zeigen alle Spektren der Quantenfilme (Proben A und B) und des aQW (Probe B) sowie der entsprechenden Quantendrähte. In Probe A weist QWR1 das stärkste Drahtsignal auf, während QWR3 am schwächsten leuchtet. Da die QWR1-Emission spektral mit den Flanken des QW-Signals überlappt, wurden für die polarisations-, temperatur- und leistungsabhängigen Messungen nur noch die Signale des QWR2 und des QWR4 und außerdem das des QWR3 in Probe B verwendet.

Aus den Spektren geht hervor, wie wenig intensiv die schwachen Signale (insbesondere die von aQWR1 und aQWR2) in Relation zu den anderen sind. Es ist jedoch bemerkenswert, dass die Intensitäten der Quantendrähte in Probe A und auch die des QWR3 in Probe B mit der QW-Emission vergleichbar sind, obwohl man bei den Quantendrähten eine um rund zwei Größenordnungen kleinere Querschnittsfläche anregt. Dies deutet auf eine starke Diffusion von Ladungsträgern oder Exzitonen innerhalb der Anregungsregion hin, wie sie auch in konventionellen T-förmigen Quantendrähten beobachtet wird (vergleiche Kapitel 5.2 und [Gro94]). Daraus ergibt sich direkt die Abwesenheit nichtstrahlender Rekombinationskanäle für Temperaturen um 5 K. In der unmittelbaren Umgebung der rein verspannungsinduzierten Quantendrähte können demnach Versetzungen ausgeschlossen werden.

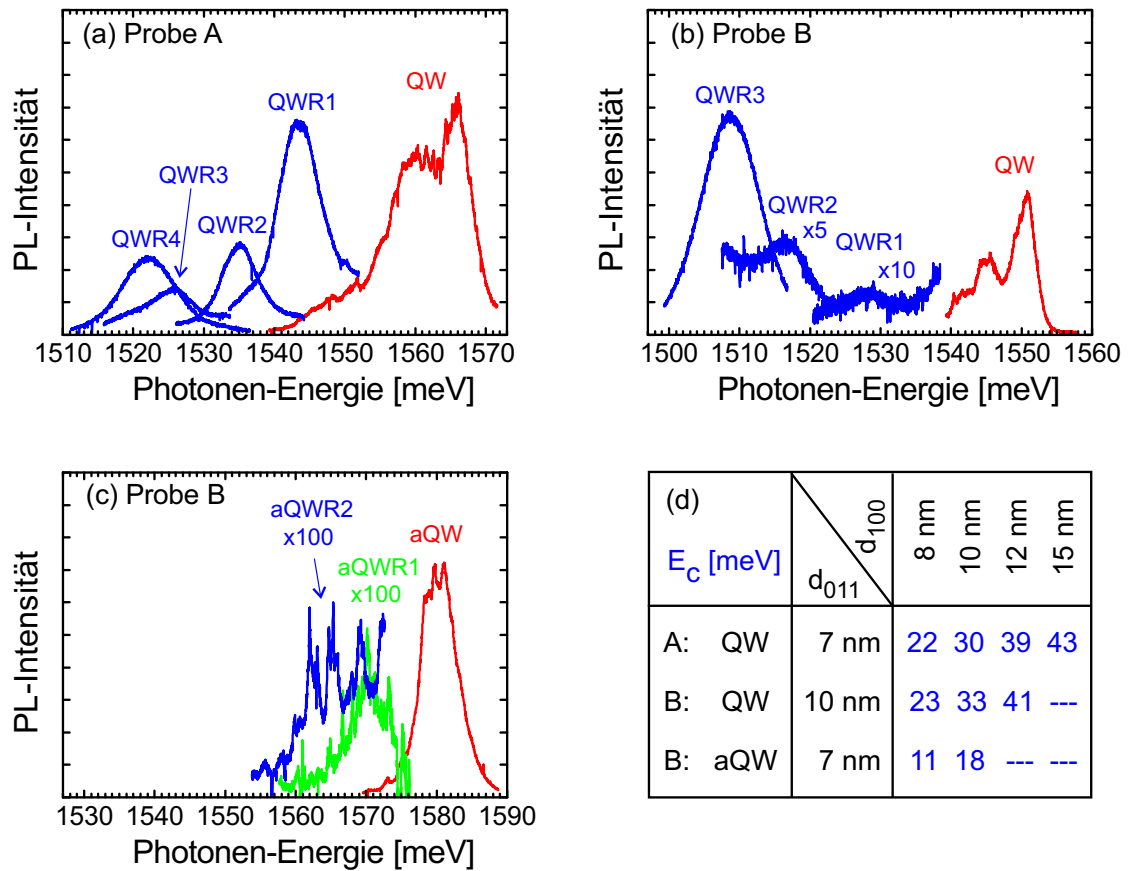


Abbildung 73: Zusammenfassung aller in den Abbildungen 69 bis 72 gezeigten Spektren und der resultierenden Einschlussenergien. Einzelheiten sind im Text erläutert.

Wie schon aus den Spektren klar wird, steigt die Einschlussenergie systematisch mit zunehmender Dicke der verspannenden Schicht. Dieses erwartete Verhalten kann für alle Strukturen auch aus Tabelle (d) abgelesen werden, die eine Übersicht über die experimentellen Werte gibt. Zusätzlich ist ersichtlich, dass für die Quantendrähte in den Quantenfilmen QW bei identischer Dicke d_{100} der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage die Einschlussenergie in Probe B größer als in A ist. Der wesentliche Unterschied zwischen den beiden Proben A und B besteht in der Dicke des überwachsenen QW, die 7 bzw. 10 nm beträgt.

Interessant ist auch der Vergleich der Quantendrähte in den je 7 nm breiten GaAs-Lagen. Während sich in Probe A der GaAs-Quantenfilm direkt an der Spaltfläche befindet, ist der aQW in Probe B 40 nm von ihr entfernt. Aus dem größeren Abstand folgen kleinere Verspannungen, welche für die beiden beobachteten Quantendrähte aQWR1 und aQWR2 zu Einschlussenergien führen, die bezüglich derer von QWR1 und QWR2 um 11 bzw. 12 meV verringert sind. Die Werte von bis zu 43 meV, die sich für die Quantendrähte direkt an der Spaltfläche ergeben, liegen im oberen Bereich der in Abbildung 8 auf Seite 18 eingetragenen Datenpunkte aus der Literatur. Für die Realisie-

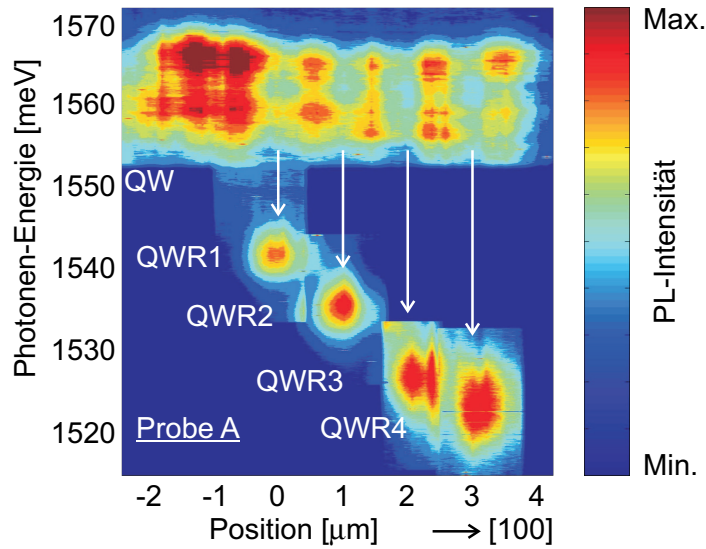


Abbildung 74: Diese Art der Präsentation der Daten von Probe A (vergleiche Abbildungen 69 und 70) zeigt, wie die Mikro-Photolumineszenz durch Kombination der räumlichen und spektralen Informationen eine Signalidentifizierung ermöglicht. So wird am Ort der Quantendrähte die QW-Intensität unterdrückt, da die Ladungsträger leicht den energetisch tiefer liegenden Quantendraht erreichen können.

rung hoher Einschlussenergien hat sich somit das in dieser Arbeit verfolgte Konzept rein verspannungsinduzierter Quantendrähte als erfolgreich erwiesen.

Eine andere Art der Datendarstellung ist in Abbildung 74 zu sehen. Waren bisher bei den Flächenrasterungen beide Raumkoordinaten aufgetragen, so sind hier nur die Spektren repräsentiert, welche in [100]-Richtung entlang der Linie durch die T-Kreuzungen aufgenommen wurden. Dafür bietet diese Darstellungsform die Möglichkeit, auch die Energiekoordinate zu berücksichtigen. So wird die für die Mikro-Photolumineszenz wichtige Kombination von räumlicher und spektraler Auflösung erkennbar. Alle Spektren sind auf das jeweilige Signalmaximum normiert. Diese Abbildung zeigt noch einmal, dass die Quantendrähte, welche einen Abstand von $1\text{ }\mu\text{m}$ aufweisen, die QW-Emission unterdrücken. Erneut kann man die Doppelspitze des QW-Signals, die schlechtere Qualität von QWR3 und QWR4 und das systematische Anwachsen der Einschlussenergie deutlich erkennen.

Vergleich mit den Simulationen

In Abbildung 75 werden die experimentell ermittelten Einschlussenergien E_c (in Abbildung 73(d) tabelliert) den berechneten gegenübergestellt (vergleiche Abschnitt 3.7).

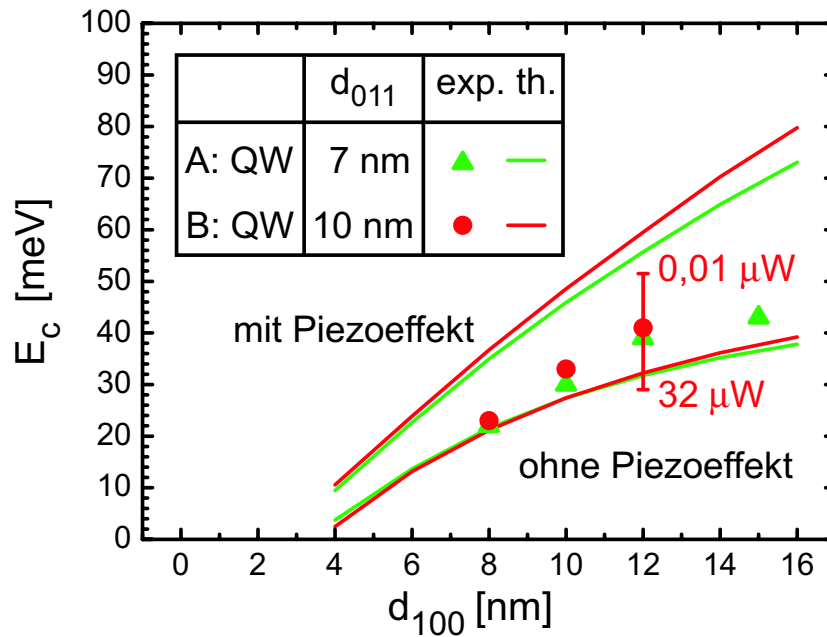


Abbildung 75: Experimentelle (exp.) und theoretisch berechnete (th.) Einschlussenergien E_c für verschiedene Dicken der Verspannungsschicht d_{100} . Die Breiten d_{011} des überwachsenen QW von 7 und 10 nm gehören zu den untersuchten Proben A und B. Der Balken gibt den Bereich der gemessenen Einschlussenergien an, wenn die Anregungsleistung um den Standardwert von $1,0 \mu W$ variiert wird.

Das Ansteigen von E_c mit zunehmender Dicke der Verspannungsschicht wird von den Einband-Rechnungen gut reproduziert. Ebenso stimmen Theorie („mit Piezoeffekt“) und Experiment darin überein, dass die Werte von Probe B ($d_{011} = 10$ nm) stets höher sind als diejenigen von Probe A ($d_{011} = 7$ nm). Die Trends werden also richtig wiedergegeben.

Allerdings herrscht keine Übereinstimmung in den Absolutwerten. Die mit Berücksichtigung des Piezoeffekts berechneten Einschlussenergien sind deutlich größer als die mit Mikro-Photolumineszenz bestimmten. Dieses Verhalten lässt sich jedoch mit der starken Abhängigkeit der Einschlussenergie E_c von der Anregungsleistung verstehen. In Kapitel 7.6 wird erklärt, warum für rein verspannungsinduzierte Quantendrähte E_c mit steigender Anregungsleistung abnimmt. Die in der Abbildung aufgetragenen experimentellen Datenpunkte beziehen sich auf eine Anregung mit $1,0 \mu W$. Verringert man diese Leistung um den Faktor 100, so erhöht sich die Einschlussenergie zum Beispiel für den Quantendraht mit $d_{100} = 12$ nm und $d_{011} = 10$ nm um mehr als 10 meV. Bei Steigerung der Anregungsleistung P auf bis zu $32 \mu W$ sinkt die Einschlussenergie auf 29 meV. Der zugehörige Wertebereich von E_c ist im Graphen eingezeichnet.

Die beobachteten leistungsabhängigen Effekte werden in den Simulationen vernachlässigt (Rechnungen „mit Piezoeffekt“ entsprechen dem Grenzfall $P \rightarrow 0$, vergleiche Kapitel 7.6). Wenn man daher von den absoluten Werten absieht, gibt der mit **nextnano**³ prognostizierte Kurvenverlauf gut die experimentellen Daten wieder. Auf diese Weise untermauern die Mikro-Photolumineszenz-Messungen die Resultate aus Kapitel 3.

7.4 Polarisationsabhängige Messungen

Nachdem die Existenz rein verspannungsinduzierter Quantendrähte nachgewiesen wurde, sollen nun deren Eigenschaften genauer studiert werden. Dazu sind in diesem Abschnitt die Ergebnisse der polarisationsabhängigen Messungen dargestellt. Zunächst kann man in den Teilbildern (a) und (b) der Abbildung 76 die Spektren der (011)-Quantenfilme der Proben A und B sehen. Diese Signale wurden im Bereich der Referenzbarriere in einem Abstand von $1\,\mu\text{m}$ zu QWR1 aufgenommen. Die Anregung erfolgte mit linearer Polarisation in $[100]$ -Richtung, also mit einem elektrischen Feldvektor parallel zum Quantenfilm QW (transversal elektrisch).

In beiden Fällen ist eine deutliche Dominanz der $[100]$ - gegenüber der $[011]$ -Polarisation zu beobachten. Das Verhältnis der Maximalintensitäten beträgt 10:1 für Probe A sowie 5:1 für Probe B und ist mit der verspannten Struktur aus Abschnitt 6.5 vergleich-

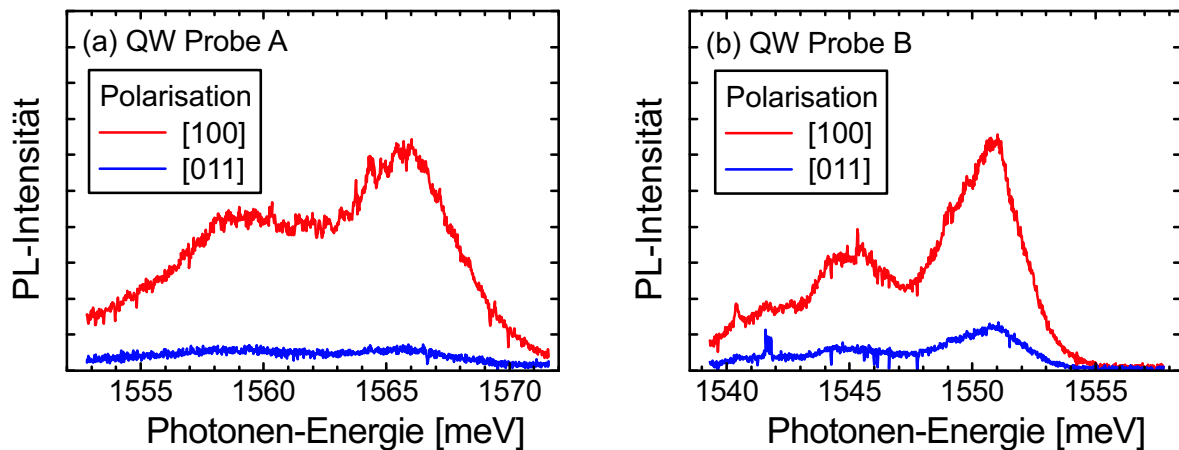


Abbildung 76: In beiden Proben zeigt das QW-Signal vorwiegend eine lineare Polarisation in $[100]$ -Richtung. Die Spektren wurden $1\,\mu\text{m}$ vom QWR1 entfernt im Bereich der Referenzbarriere mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0\,\mu\text{W}$; $I = 60\,\text{s}$; $E_{\text{exc}} = 1589,0/1585,1\,\text{meV}$; $PD1 = [100]$; $T = 5,8/5,2\,\text{K}$.

bar (7,5:1). Das mit 12:1 klarste Polarisationsverhältnis wurde jedoch für die unverspannte Probe in Kapitel 5.3 ermittelt.

Das Polarisationsverhalten einiger Quantendrähte wird in Abbildung 77 gezeigt. Hier erfolgte die Anregung mit einer $[011]$ -Polarisation, mit der sich eine etwas stärkere PL-Emission erzielen ließ als in der $[100]$ -Konfiguration. Man kann erkennen, dass alle Quantendrahtsignale senkrecht zum Quantenfilm QW polarisiert sind, also mit einem elektrischen Feldvektor in $[011]$ -Richtung (transversal magnetisch). In Teilbild (a) weist zum Beispiel das QWR2-Signal von Probe A ein Intensitätsverhältnis von etwa 3:1 zwischen $[011]$ - und $[100]$ -Polarisation auf.

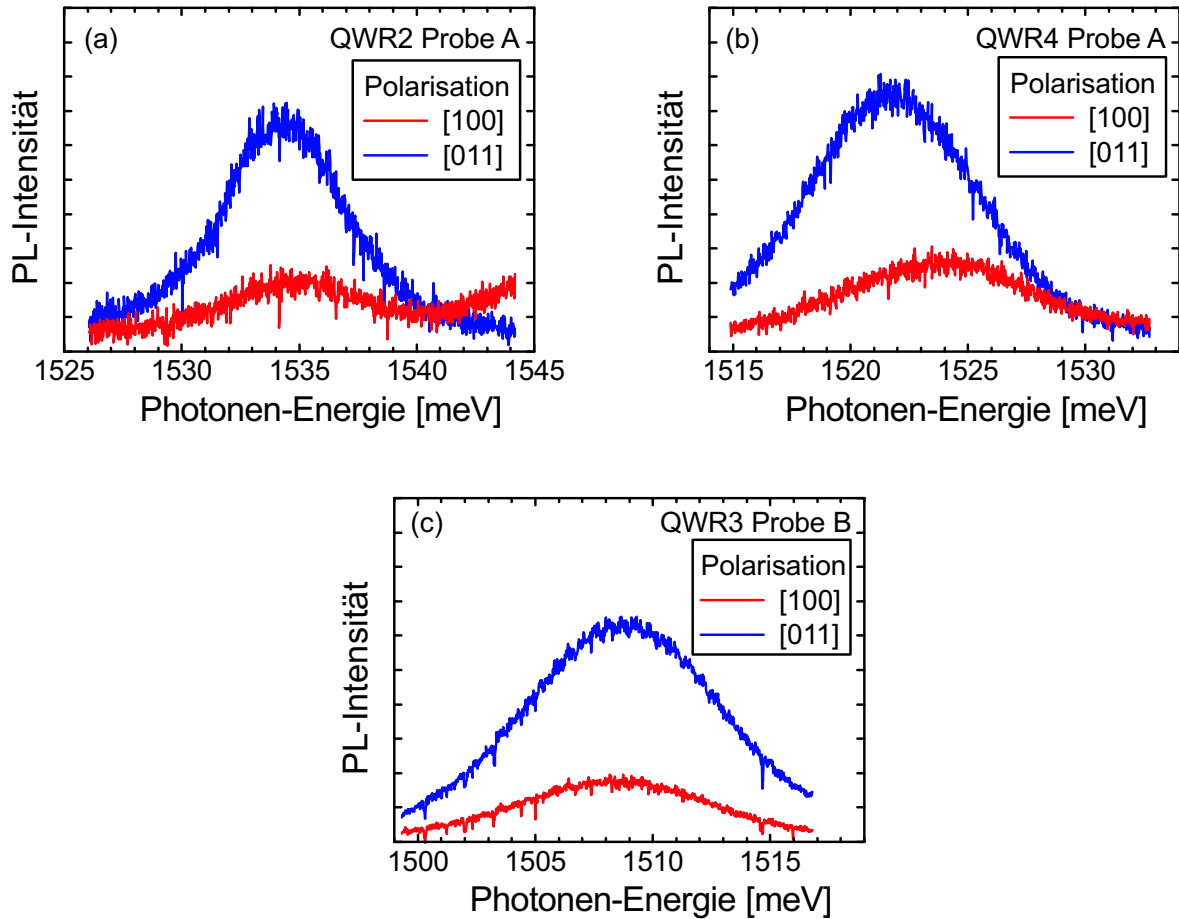


Abbildung 77: Im Gegensatz zu den Quantenfilmen weisen die verspannten Quantendrähte eine stärkere Polarisation in $[011]$ -Richtung auf. Die Spektren wurden am Ort der Quantendrähte mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu\text{W}$; $I = 60 \text{ s}$; $E_{\text{exc}} = 1589,0/1585,1 \text{ meV}$; $PD1 = [011]$; $T = 5,2/4,9 \text{ K}$.

Nur in Abbildung 77(a) kann man für die [100]-Polarisation oberhalb 1540 meV den Ausläufer des QW-Signals erkennen. In den Teilbildern (b) und (c) sind für QWR4 (Probe A) und QWR3 (Probe B) die Photolumineszenz-Spektren für die beiden untersuchten Polarisationsrichtungen abgebildet. Die [011]-Ausrichtung wird mit den Verhältnissen 3:1 bzw. 3,5:1 gegenüber der [100]-Polarisation bevorzugt. Das in [100]-Richtung polarisierte Signal in (b) ist um 2 meV gegenüber dem senkrecht zum QW polarisierten blauverschoben. Die Ursache für diesen Effekt ist noch nicht bekannt. Jedoch könnten auch hier die bei den AFM-Aufnahmen beobachteten Stufen eine Rolle spielen, da kein anderer Quantendraht ein derartiges Verhalten zeigte.

Grundsätzlich erschweren die komplizierte Valenzbandstruktur sowie deren verspannungsinduzierte Veränderungen eine detaillierte Diskussion der Polarisations Eigenschaften. Trotzdem kann man feststellen, dass das beobachtete Polarisationsverhalten der verspannten Quantendrähte qualitativ mit dem des unverspannten Quantendrahts aus Abschnitt 5.3 übereinstimmt. Obwohl dort die [011]-Polarisation mit einem Verhältnis von 10:1 deutlicher bevorzugt war, werden die Ergebnisse als weiteres Indiz für das Vorliegen von Quantendrahtstrukturen gewertet.

Im Gegensatz zu obigen Resultaten zeigte in Kapitel 6.5 die Emission des Ensembles verspannter T-Kreuzungen eine vorwiegende [100]-Polarisation. Dieser Sachverhalt ist ein Argument dafür, dass in jenem Fall kein Quantendrahtsignal, sondern ein Quantenfilmsignal untersucht wurde.

7.5 Temperaturabhängige Messungen

Der folgende Abschnitt widmet sich der für Anwendungen relevanten Frage, bis zu welchen Temperaturen die Signale der Quantendrähte beobachtbar sind. Zuerst werden jedoch die temperaturabhängigen Quantenfilmsignale vorgestellt. In Abbildung 78 sind dazu die Spektren der Quantenfilme in den Proben A und B für verschiedene Temperaturen zusammengefasst. Sie wurden wieder im Abstand von $1\text{ }\mu\text{m}$ vom QWR1 im Bereich der Referenzbarriere aufgenommen. Man erkennt in beiden Teilbildern, dass sich die Form der Photolumineszenz-Spektren ändert, wenn die Temperatur erhöht wird. Zum einen weist dabei das niederenergetische Signal bei 18 bzw. 22 K eine im Verhältnis zum Hauptsignal deutlich geringere Intensität auf als bei 6 bzw. 5 K. Zum anderen werden mit steigender Temperatur die Spektren zunehmend glatter.

Beide Effekte können erklärt werden, wenn man annimmt, dass es sich bei den niederenergetischen Signalen um Photolumineszenz-Licht aus lokalisierten Exziton-Zuständen

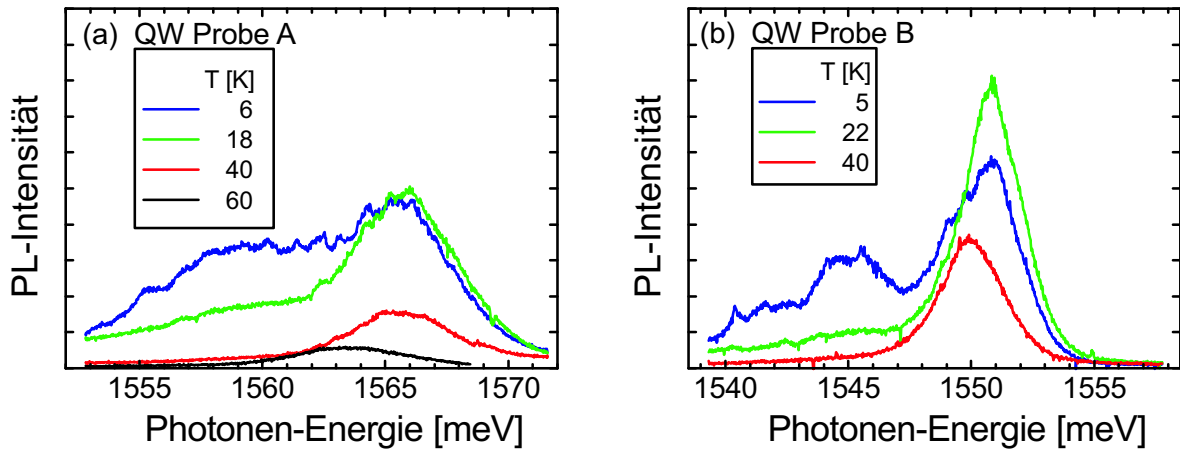


Abbildung 78: Mit steigender Temperatur verschwinden in den Spektren der Quantenfilme die charakteristischen Spitzen und das niederenergetische Signal wird kleiner. Die Spektren wurden mit folgenden Parametern im Bereich der Referenzbarriere ($1\,\mu\text{m}$ vom QWR1 entfernt) aufgenommen: $P = 1,0\,\mu\text{W}$; $I = 30/60\,\text{s}$; $E_{\text{exc}} = 1589,0/1585,1\,\text{meV}$; $PD1 = PD2 = [100]$.

handelt. Mit steigender Temperatur werden die Ladungsträger aus diesen Zuständen heraus angeregt, beispielsweise in den Quantenfilm. Deswegen verschwinden die charakteristischen Spitzen und die Linienform wird glatter. Zusätzlich gewinnt das Hauptsignal (relativ zur niederenergetischen Emission) an Stärke, da die lokalisierten Zustände energetisch tiefer liegen.

Bei einer Temperatur von 40 K ist in beiden Teilbildern nur noch eine Signalspitze zu erkennen. Diese weist jeweils eine leichte Rotverschiebung auf. Bei 60 K ist in Abbildung 78(a) diese Energieabsenkung (ca. $2\,\text{meV}$), die auf die temperaturbedingte Verkleinerung der Bandlücke zurückgeführt werden kann, noch klarer zu erkennen. Zusätzlich verliert das PL-Signal mit steigender Temperatur deutlich an Intensität, was wieder an der zunehmenden Phonon-Wechselwirkung liegt. So ist oberhalb von 60 K kaum mehr ein Signal detektierbar. Der schnelle Intensitätsabfall weist auf eine starke Zunahme nichtstrahlender Rekombinationskanäle hin.

Diese Annahme wird durch die temperaturabhängigen Spektren der Quantendrähte in Abbildung 79 unterstützt. War das anregende Licht für die Untersuchungen der Quantenfilme in $[100]$ -Richtung polarisiert, so wurde für die folgenden Messungen die hier günstigere $[011]$ -Ausrichtung gewählt. Zunächst erkennt man, dass es zu keiner anfänglichen Blauverschiebung wie beim Signal des unverspannten Quantendrahts kommt (vergleiche Seite 92). Dies ist aufgrund der fehlenden lokalisierten Zustände auch nicht

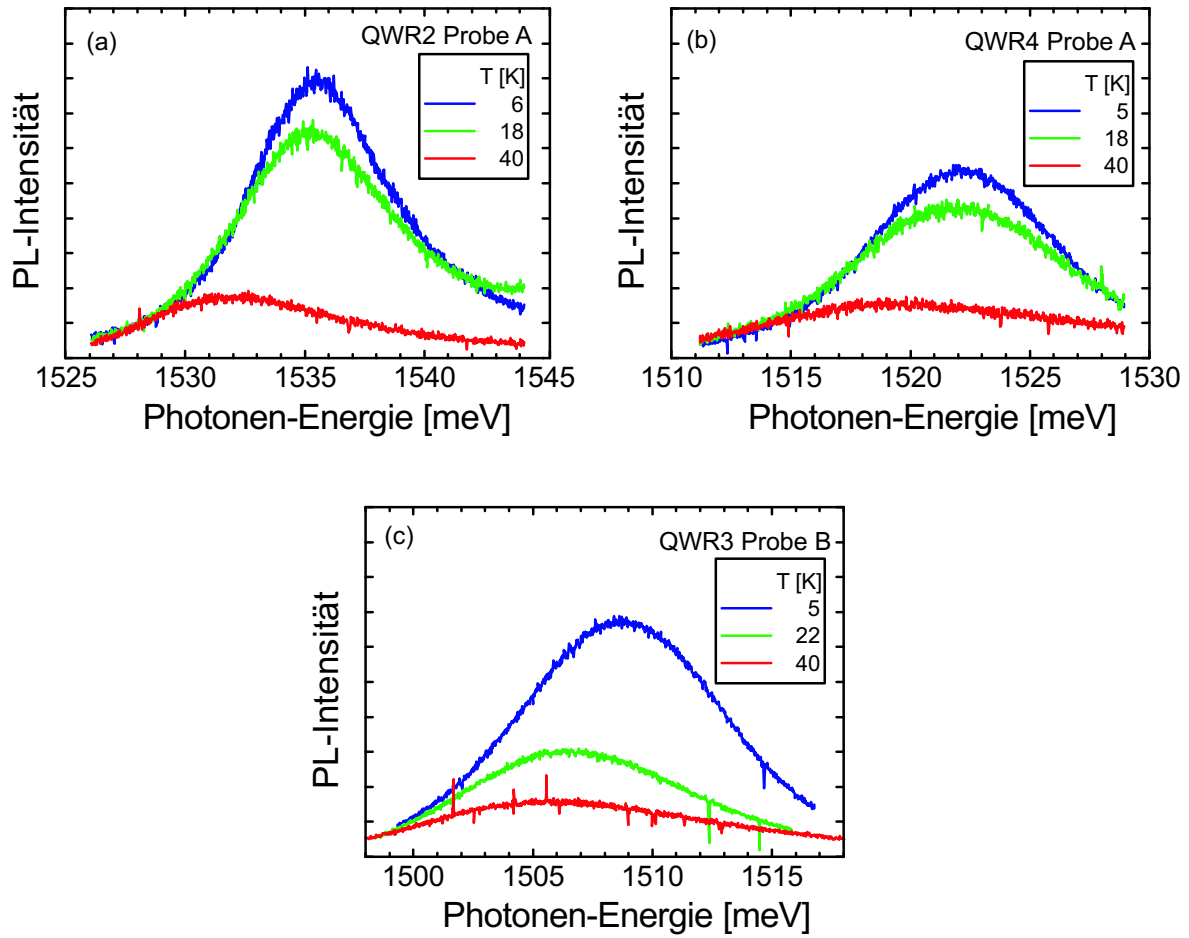


Abbildung 79: Die Spektren der verspannungsinduzierten Quantendrähte zeigen mit steigender Temperatur eine starke Intensitätsabnahme. Sie wurden an den Positionen der T-Kreuzungen mit folgenden Parametern aufgenommen: $P = 1,0 \mu W$; $I = 30/60$ s; $E_{\text{exc}} = 1589,0/1585,1$ meV; $PD1 = PD2 = [011]$.

zu erwarten. Im Temperaturintervall zwischen 5 bzw. 6 K und 40 K verschiebt sich die spektrale Lage der PL-Emission der Quantendrähte um 3 bis 4 meV zu kleineren Energien. Hierfür ist auch in diesem Fall die Temperaturabhängigkeit der Bandlücke verantwortlich.

Hingegen überrascht die zu beobachtende Intensitätsabnahme, die viel stärker ist als beim unverspannten Quantendraht. Da für die betrachteten verspannungsinduzierten Quantendrähte Einschlussenergien von 30 bis 43 meV ermittelt wurden, sollte die PL-Emission auch bei Raumtemperatur (293 K, entsprechend 25 meV) messbar sein. Jedoch waren über 40 K keine Quantendrahtsignale beobachtbar. Die wohl einzige Erklärung hierfür ist ein starker Anstieg der nichtstrahlenden Rekombination. Dieser Sachverhalt

bedarf allerdings noch weiterer Untersuchungen. Ein Ansatzpunkt ist hierbei ein möglicher Zusammenhang mit den speziellen [011]-Wachstumsbedingungen [Pfe90], insbesondere in Verbindung mit dem Wachstum auf verspannten Substraten. Einen Fortschritt könnte auch die Durchführung eines Nachheisschritts bringen [Yos01a, Yos02]. Für unverspannte Proben wurde damit bereits eine deutliche Verbesserung der Qualität der (011)-Flächen erzielt (siehe Kapitel 8.1).

7.6 Leistungsabhängige Messungen

Die Untersuchungen der Eigenschaften der verspannten Quantendrahtstrukturen wird nun mit der Darstellung der leistungsabhängigen Messungen abgeschlossen. Bei den bisherigen Experimenten erfolgte die Anregung stets mit der gleichen Leistung, so dass die ermittelten Spektren vergleichbar sind. Um nichtlineare Effekte zu minimieren, sollte möglichst schwach angeregt werden. Der gewählte Wert von $1,0 \mu\text{W}$ ist dabei ein Kompromiss, der es erlaubt, Flächenrasterungen in vertretbarer Zeit aufzunehmen.

In diesem Kapitel variieren die Leistungen zwischen $0,01$ und $100 \mu\text{W}$. Bei den verwendeten Anregungsenergien von $1585,1$ bzw. $1589,0 \text{ meV}$ ergibt sich ein Photonen-Fluss zwischen $3,9 \cdot 10^{10}$ und $3,9 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$ innerhalb der Fokusfläche, die einen Durchmesser von rund 800 nm aufweist. Die im Folgenden gezeigten Spektren sind in zweifacher Hinsicht normiert. Zum einen wurde die (mit steigender Leistung kleiner werdende) Integrationszeit berücksichtigt. Zum anderen erfolgte eine Normierung bezüglich der Anregungsleistung, so dass alle Spektren die gleiche Höhe aufweisen, wenn ein linearer Anstieg der PL-Intensität mit der Leistung vorliegt.

Quantenfilme

Wie bei allen vorangehenden Untersuchungen werden zunächst die Quantenfilme diskutiert. Diese sind in Abbildung 80 zu sehen, wobei (a) das QW-Signal der Probe A am Ort des QWR2 und (b) die QW-Signal der Probe B am Ort des QWR1 zeigt. Die Spektrenaufnahme erfolgte nicht am Ort der Referenzbarriere, um die Gesamtmesszeit zu minimieren.

Bereits am Anfang des Abschnitts 7.3 wurde erwähnt, dass in der Nähe der Verspannungslagen bei der Standardanregungsleistung von $1,0 \mu\text{W}$ der von lokalisierten Zuständen stammende niederenergetische Anteil des QW-Signal bei 1559 meV dominant

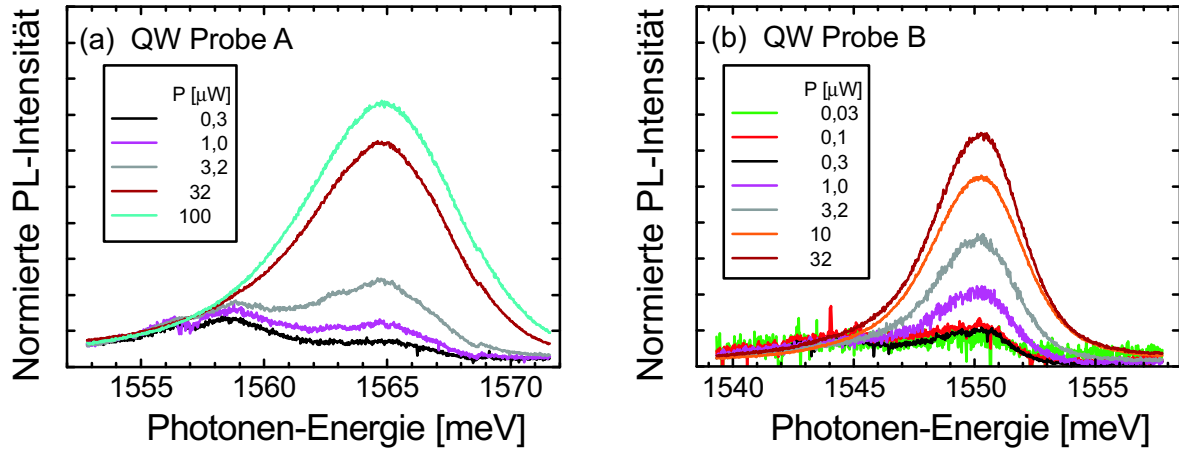


Abbildung 80: In den Spektren der Quantenfilme (aufgenommen am Ort des QWR2 bzw. QWR1) steigt die Intensität superlinear mit der einfallenden Leistung. Die Spektren sind bezüglich Integrationszeit und Anregungsleistung normiert und wurden mit folgenden Parametern aufgenommen: $I = 1\text{--}90$ s; $E_{\text{exc}} = 1589,0/1585,1$ meV; $PD1 = PD2 = [100]$; $T = 6,6/5,4$ K.

ist. In Teilbild (a) kann man erkennen, dass mit steigender Leistung das höherenergetische Signal bei 1565 meV an Gewicht gewinnt. Dieses Verhalten lässt sich wie folgt verstehen: Bei tiefen Temperaturen sind es vorwiegend die energetisch tiefer liegenden Zustände, die zuerst besetzt werden. Deren Anzahl ist jedoch begrenzt. Das bedeutet, dass mit zunehmender Leistung bei immer noch tiefen Temperaturen es weiterhin Emission aus lokalisierten Zuständen gibt. Dieses Signal verliert jedoch im Vergleich zur steigenden QW-Intensität an relativer Stärke. So kann bei 32 μW nur noch eine Signalspitze beobachtet werden.

Für Probe B zeigt Teilbild (b) ein ähnliches Verhalten. In beiden Fällen ändert sich die spektrale Position des Hauptsignals kaum, wenn man die Anregungsleistung um Größenordnungen variiert. Auffällig ist auch, dass für beide Strukturen die Intensität für einen bestimmten Anregungsbereich superlinear steigt. Dies kann Abbildung 81 entnommen werden, in der die Maximalintensitäten zusammengefasst sind. Unterhalb von 0,3 μW nehmen die Signale linear mit der einfallenden Leistung zu. Zwischen 0,3 und 32 μW ist ein superlinearer Anstieg zu beobachten, der sich für noch höhere Anregungsleistungen ansatzweise wieder einem linearen Verlauf annähert.

Eine Erklärung für dieses Verhalten beruht auf der gleichzeitigen Erfüllung zweier Annahmen: Erstens muss ein beträchtlicher Anteil der bei niedrigen Leistungen im Quantenfilm generierten Ladungsträger in den Quantendraht diffundieren. Zweitens ist

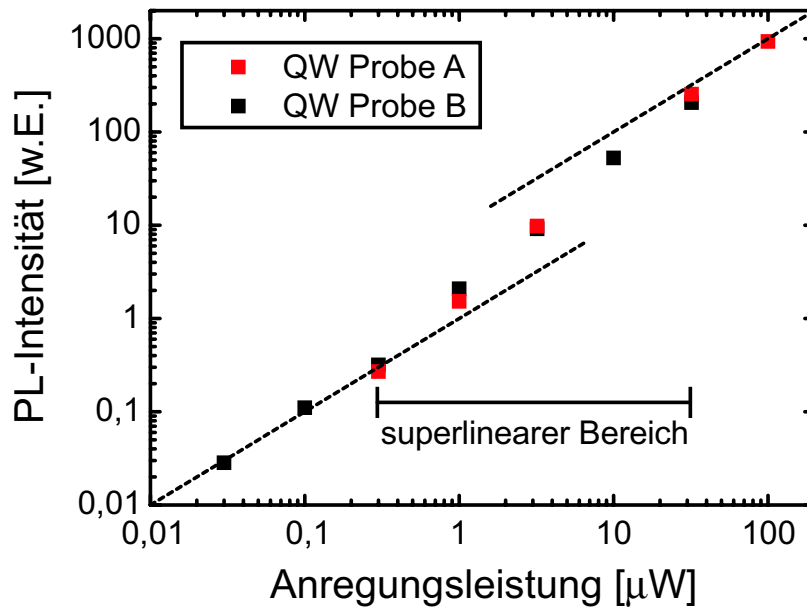


Abbildung 81: Die in willkürlichen Einheiten (w.E.) aufgetragenen Maximalintensitäten aus Abbildung 80 offenbaren für mittlere Anregungsleistungen einen superlinearen Anstieg, der durch eine Sättigung des Quantendrahtsignals erklärt werden kann.

eine Sättigung des Quantendrahtsignals mit steigender Anregungsleistung erforderlich. Eine kurze Rechnung zeigt, dass dann genau im Bereich der Sättigung ein superlinearer Anstieg zu erwarten ist. Für sehr hohe Leistungen verläuft der Anstieg wieder linear, da zwar alle Quantendrahtzustände besetzt werden, diese aber an Gewicht verlieren.

Quantendrähte

In Abbildung 82 sind nun die leistungsabhängigen Spektren von QWR2 und QWR4 (Probe A) und QWR3 (Probe B) zu sehen. Die Signale sind wieder bezüglich der Anregungsleistung normiert.

Bereits in Kapitel 7.3 wurde auf die glatte Form der Spektren der Quantendrähte hingewiesen. Beim Blick auf Abbildung 82 fällt auf, dass diese Linienform auch für die niedrigsten Anregungsleistungen beibehalten wird. Im Gegensatz dazu zeigte der unverspannte T-förmige Quantendraht in Abschnitt 5.5 mit abnehmender Leistung eine Intensivierung der charakteristischen Spitzen. Diese rühren von lokalisierten Exzitonen an Heterogrenzflächen her und könnten durch einen Nachheisschritt (siehe Kapitel 8.1) vermieden werden [Yos01a, Yos02].

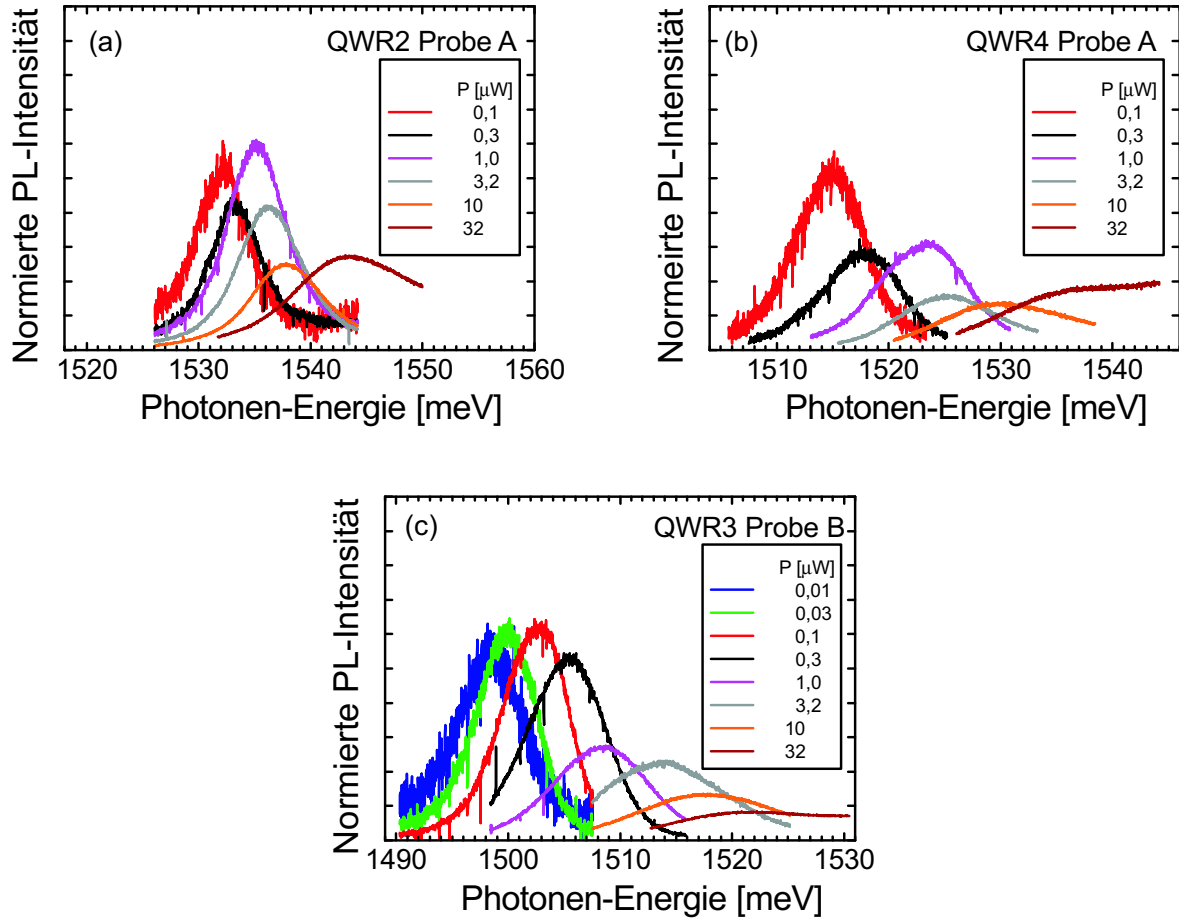


Abbildung 82: Auch für die niedrigsten Anregungsleistungen sind die Linienformen der Quantendrahtsignale glatt. Die beobachtete Rotverschiebung bei Verringerung der Leistung führt zu größeren Einschlussenergien. Die Spektren wurden am Ort der T-Kreuzungen mit folgenden Parametern aufgenommen: $I = 3\text{-}90$ s; $E_{\text{exc}} = 1589,0/1585,1$ meV; $PD1 = PD2 = [011]$; $T = 6,2/5,2$ K.

Nachdem die hier untersuchten Proben ohne diese Methode gewachsen wurden und da das QW-Signal durchaus vereinzelte Spitzen aufweist, überrascht die beobachtete glatte Linienform. Sie kann damit erklärt werden, dass es entlang der Quantendrähte zu Grenzflächenrauigkeiten kommt, die sich auf einer Skala abspielen, die kleiner als der Exziton-Durchmesser ist. Da hierfür diffundierende Indium-Atome aus der Verzerrungsschicht verantwortlich sind, ist die Grenzflächenbeschaffenheit anders als in der untersuchten unverspannten Struktur. Anstatt zu lokalisieren, bewegen sich die Exzitonen dann in einem Quantendraht mit einer mittleren Breite, die zwischen zwei ganzzahligen Monolagen liegt (vergleiche Kapitel 4.3). Da sich dies von der Bewegung in einem System mit perfekt glatten Wänden unterscheidet, weisen die Spektren weiterhin Linienbreiten auf, die mit allen bislang vorgestellten vergleichbar sind.

In Abbildung 82(a) werden die Spektren im Leistungsintervall zwischen 0,1 und 32 μW gezeigt, die an der Kreuzung der 10 nm dicken $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lage und dem 7 nm breiten (011)-Quantenfilm aufgenommen wurden. Neben der bereits erwähnten glatten Linienform der Signale fällt auf, dass sie mit zunehmender Anregungsleistung relativ an Intensität verlieren und sich systematisch zu höheren Energien verschieben.

Die beobachtete Blauverschiebung von 1532 nach 1543 meV für QWR2 bei einer Leistungsänderung von 0,1 nach 32 μW stellt einen deutlichen Unterschied zu den unverspannten Strukturen dar. Die Erklärung muss demzufolge mit dem Entstehungsmechanismus der Quantendrähte zu tun haben. Wie in Abbildung 6 auf Seite 15 zu sehen ist, liegt bei unverspannten Proben das Maximum der Aufenthaltswahrscheinlichkeit für Elektronen und Löcher genau an der T-Kreuzung. Im Gegensatz dazu sind die Elektron- und Lochwellenfunktionen bei den verspannungsinduzierten Strukturen räumlich getrennt. Wie gezeigt wurde, bewirken die Verspannungen über den Piezoeffekt die Ladungstrennung (siehe Kapitel 3.6). In die Rechnungen wurden jedoch keine Vielteilcheneffekte mit eingeschlossen. So müssen aufgrund der bereits vorhandenen räumlich getrennten Elektronen und Löcher eigentlich Abschirmeffekte berücksichtigt werden, welche für die effektive Verringerung des Piezoeffekts mit zunehmender Anregungsleistung verantwortlich sind.

Aus Kapitel 3.6 geht zudem hervor, dass das Einbeziehen der piezoelektrischen Polarisationsladungen für eine Energieabsenkung sorgt. Diese wird nun mit steigender Leistung mehr und mehr kompensiert, so dass die beobachtete Blauverschiebung auftritt. Da andererseits die energetische Position des QW-Signals nahezu unverändert bleibt (vergleiche Abbildung 80), nimmt die Einschlussenergie folglich mit sinkender Leistung zu. So übertrifft für den Quantendraht QWR2 der Wert bei 0,1 μW mit 33 meV den in Abschnitt 7.3 für 1,0 μW angegebenen um 3 meV.

Das Verhalten des Quantendrahts QWR4 in Abbildung 82(b) entspricht dem von QWR2. Auch hier sind die Signale glatt und man kann eine spektrale Verschiebung beobachten. Für 0,1 μW wird sogar eine Einschlussenergie von 50 meV erreicht. Ebenso ist wieder eine tendenzielle Abnahme der normierten Signalintensität mit größer werdender Leistung festzustellen. Grundsätzlich ist noch anzumerken, dass bei Probe A die einzelnen Messungen nicht in unmittelbarer Abfolge aufgenommen wurden. So konnten kleine Intensitätsschwankungen auftreten, die sich in den Teilbildern (a) und (b) in einem nicht monotonen Signalabfall äußern.

Hingegen verläuft in Abbildung 82(c) die Intensitätsabnahme für kleiner werdende Anregungsleistungen kontinuierlich. Aufgrund der starken PL-Emission des Quanten-

drahts QWR3 in Probe B konnten hier Messungen bis hinunter zu $0,01 \mu\text{W}$ durchgeführt werden. Wieder sind glatte Linienformen und eine spektrale Verschiebung zu sehen, die sich bei kleinen Leistungen erwartungsgemäß einer Grenze annähert.

Die Abhängigkeit der Signalintensität von der Anregungsleistung ist auch in Abbildung 83 dargestellt. Dabei bedeutet die Abweichung vom linearen Verlauf, dass man in den Bereich der Sättigung gelangt ist. Das hier zu erkennende Gebiet der relativen Leistungsabnahme beginnt bei $0,3 \mu\text{W}$. Dieser Wert entspricht genau der unteren Grenze des superlinearen Bereichs in Abbildung 81, in der die Leistungsabhängigkeit der Maximalintensitäten der QW-Emission aufgetragen ist. Damit wird die zuvor gegebene Erklärung für die Abweichung von einem linearen Anstieg des Quantenfilmsignals mit der Leistung untermauert.

Abbildung 83 zeigt außerdem die Abhängigkeit der Einschlussenergie aller betrachteten Quantendrähte von der Anregungsleistung. Der dargestellte Verlauf ist eine Konsequenz der spektralen Verschiebung der Quantendrahtsignale mit der einfallenden Leistung. Dieser Effekt wurde bereits durch die effektive Verringerung des Piezoeffekts mit zunehmender Anregungsleistung erklärt.

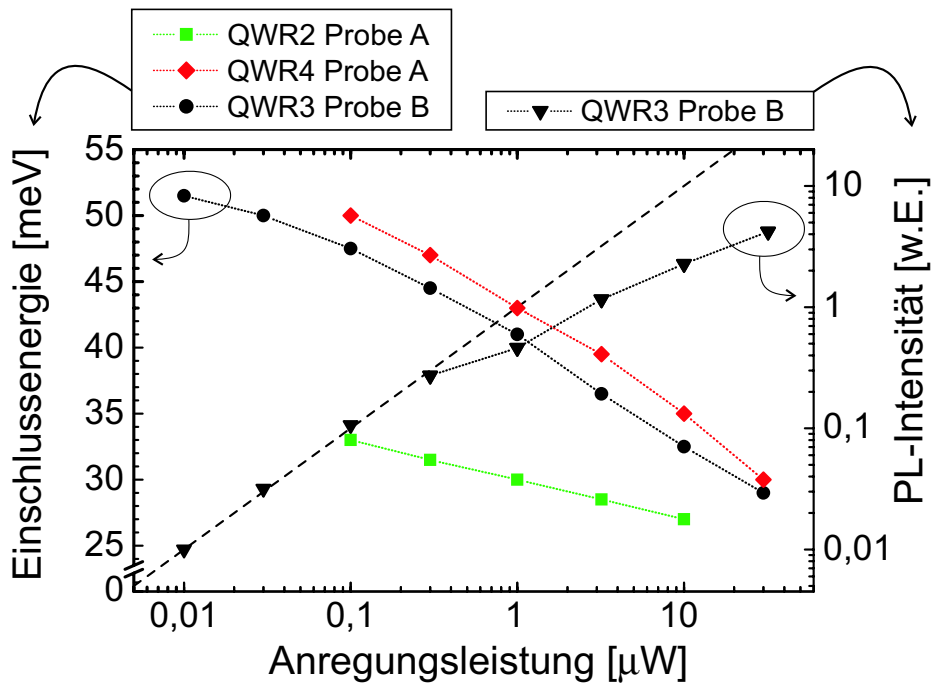


Abbildung 83: Für die drei genauer untersuchten Quantendrähte ist die Abhängigkeit der Einschlussenergie von der Anregungsleistung zusammengefasst. Für den Quantendraht QWR3 (Probe B) sind auch die entsprechenden PL-Intensitäten in willkürlichen Einheiten (w.E.) aufgetragen. Die Linien dienen der Orientierung.

Den experimentell bestimmten Wertebereich der Einschlussenergien E_c kann man mit den Simulationen vergleichen, wenn diese einmal mit und einmal ohne Berücksichtigung des Piezoeffekts durchgeführt werden. Während der erste Fall das experimentelle Verhalten für $P \rightarrow 0$ beschreibt, gilt der zweite Fall, wenn mit hoher Leistung P angeregt wird. Für QWR3 von Probe B, bei dem E_c für Anregungsleistungen zwischen 0,01 und 32 μW ermittelt wurde, ergab sich die beste Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Der entsprechende Datenbereich und die theoretischen Grenzen können Abbildung 75 entnommen werden.

Die experimentellen Einschlussenergien in Abbildung 83 variieren systematisch und es ist ersichtlich, dass sich höchste Werte nur bei geringer Anregungsleistung erzielen lassen. Wie man erkennen kann, ändert sich E_c innerhalb des gesamten Leistungsbereichs, also auch dort, wo die Intensität noch linear steigt. Damit wird ein Zusammenhang der Variation der Einschlussenergie mit Sättigungseffekten in der PL-Intensität ausgeschlossen.

Insgesamt wurde mit QWR3 aus Probe B bei einer Anregungsleistung von 0,01 μW die größte Einschlussenergie aller in dieser Arbeit behandelten Quantendrähte erzielt. Der Wert von 51,5 meV liegt nur 2,5 meV unter dem von Langbein *et al.* berichteten Rekord [Lan96]. Er demonstriert klar die Einsatzmöglichkeiten verspannungsinduzierter Quantendrähte für die Realisierung höchster Einschlussenergien.

7.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden orts aufgelöste Photolumineszenz-Messungen an einzelnen rein verspannungsinduzierten Quantendrähten vorgestellt, die Einschlussenergien von bis zu 51,5 meV aufweisen. Das ist etwas mehr als das Doppelte von $k_B T$ bei Raumtemperatur (293 K, entsprechend 25 meV) und stellt den zweithöchsten Wert dar, der bislang für CEO-Quantendrähte gemessen wurde. Die Einschlussenergien steigen wie erwartet systematisch mit der Dicke der verspannten Schicht und der Breite des überwachsenden Quantenfilms und bestätigen die mit den Simulationen prognostizierten Trends.

Jedes PL-Signal eines individuellen Quantendrahts fällt räumlich mit einem Minimum in der QW-Emission zusammen und kann durch die bekannte Probengeometrie identifiziert werden. Örtlich weniger stark lokalisierte Intensitätsmaxima zeigen diejenigen Quantendrähte, an deren Positionen Stufen mit Höhen von 7 und 13 nm existieren, welche mit AFM-Aufnahmen nachgewiesen wurden.

Trotz ihrer kleineren Querschnittsflächen weisen die Quantendrahtsignale bei tiefen Temperaturen Intensitäten auf, die mit denen der Quantenfilme vergleichbar sind. Jedoch verhindert ein starker Anstieg der nichtstrahlenden Rekombination, dass die PL-Signale der Quantendrähte auch bei Raumtemperatur detektiert werden können. Die beobachtete Polarisationsabhängigkeit unterstreicht das Vorliegen verspannungs-induzierter Quantendrähte. Zusätzlich konnten auch im Abstand von 40 nm von der Spaltkante noch Quantendrahtzustände nachgewiesen werden.

Anders als in unverspannten T-förmigen Quantendrähten wird keine Lokalisierung von Exzitonen beobachtet. Verantwortlich hierfür sind Grenzflächenrauigkeiten entlang der Quantendrähte, die wegen diffundierender Indium-Atome auf einer Skala auftreten, die kleiner als der Exziton-Durchmesser ist. Deshalb bleiben die Photolumineszenz-Linien für alle Anregungsleistungen glatt. Bei starker Anregung zeigen die Quantendrahtsignale ein Sättigungsverhalten. Durch Verringerung der einfallenden Leistung kann man die Einschlussenergie erhöhen, da Abschirmeffekte minimiert werden. Diese kompensieren bei hohen Leistungen die auf dem Piezoeffekt basierende Vergrößerung der Einschlussenergie.

8 Laufende Arbeiten

Dieses Kapitel gibt einen Ausblick auf Konzepte und Methoden, die in Zukunft die Richtung weiterer Forschungsarbeiten vorgeben können. Zunächst wird ein Nachheizverfahren zur Glättung der (011)-Quantenfilmgrenzfläche vorgestellt. Auf theoretischer Seite schließt sich die Diskussion von Modellsystemen an, die mit dem Programm **nextnano**³ simuliert wurden. In beiden Fällen werden erste Ergebnisse präsentiert, auf die weiter gehende Untersuchungen aufbauen können.

8.1 Glättung der Quantenfilmgrenzfläche

Im Lauf der vorliegenden Arbeit wurde bereits mehrfach auf ein Nachheizverfahren (engl.: annealing) verwiesen. Diese Methode soll für eine bessere Qualität der (011)-Grenzflächen sorgen und so zur Verkleinerung der Photolumineszenz-Linienbreiten sowie der nichtstrahlenden Rekombination beitragen. Grundlage hierfür ist die Glättung der zweiten Heterogrenzfläche des überwachsenen Quantenfilms.

Schwierigkeiten beim [011]-Wachstum

Die erste Grenzfläche wird beim *In-situ*-Spalten in der Wachstumskammer definiert. Sie ist deshalb atomar glatt und weist keine Rauigkeiten auf, wie mit AFM-Aufnahmen verifiziert werden kann [Yos01a]. Trotzdem ist die zweite Grenzfläche zwischen Quantenfilm und Barriere auf atomarer Skala uneben. Darauf weisen zum einen die Ergebnisse aus den vorangegangenen Kapiteln hin. Zum anderen wird die Existenz von Stufenkanten, Gräben und Inseln auch durch die Resultate vieler Publikationen unterstützt (siehe zum Beispiel [Pfe90, Gon92, Som95b, Weg97b]). Diese Rauigkeiten sind zunächst überraschend, da die Molekularstrahlepitaxie wohl das präziseste Herstellungsverfahren für Halbleiternanostrukturen ist, mit dem zum Beispiel genau definierte (100)-Quantenfilme gewachsen werden können.

Im vorliegenden Fall resultieren die Schwierigkeiten aus der unkonventionellen Wachstumsrichtung, da der Haftkoeffizient von Arsen für die unpolare (011)-Fläche kleiner ist als bei (100)-orientierten Flächen. Die kurzen Verweilzeiten der Arsen-Atome auf der Oberfläche machen beim Wachstum entlang der [011]-Richtung neben kleinen Wachstumsraten einen hohen Arsen-Überdruck und relativ geringe Substrattemperaturen im Bereich von 460 bis 500 °C notwendig.

Unter den genannten Bedingungen sind die Oberflächenbeweglichkeiten der Gallium- und Arsen-Atome reduziert. Da die Atome nicht mehr die optimalen Positionen erreichen, weist die Wachstumsoberfläche stets relativ starke Rauigkeiten auf. Untersuchungen mit Reflexionsbeugung hochenergetischer Elektronen und mit dem Rasterkraftmikroskop haben zudem gezeigt, dass je nach Wachstumsbedingung Monolagen-, Doppellagen- und Stufenwachstum sowie Bildung dreieckiger Inseln vorliegen kann [Hol98]. Als Konsequenz der genannten Schwierigkeiten und Veränderungen waren die Photolumineszenz-Linienbreiten von (011)-Quantenfilmen stets größer als die von (100)-Quantenfilmen.

Ein Verfahren, mit dem auch die zweite Grenzfläche deutlich reduzierte Rauigkeiten zeigt, wurde von Yoshita *et al.* vorgestellt [Yos01a, Yos02]. Die Methode, die später genauer beschrieben wird, beruht auf einer zeitweiligen Temperaturerhöhung während einer Pause nach dem Wachstum des (011)-Quantenfilms. In der zitierten Arbeit wurden Strukturen getestet, die keine Verspannungsschichten enthalten. Im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit ist die Überprüfung der Anwendbarkeit dieses Glättungsverfahrens auf Proben mit InAlAs-Lagen von Interesse. Die ersten Schritte auf dem Weg zu diesem Ziel werden im Folgenden dargestellt.

Um die aufwändige CEO-Präparation zu vermeiden, wurde zunächst versucht, diese Methode zur Glättung der Grenzfläche beim Wachstum auf einer (011)-Halbleiterscheibe anzuwenden. Die Testserie bestand aus vier im Aufbau identischen Proben, die als wesentliche Schicht einen 7 nm breiten GaAs-Quantenfilm enthielten. Mit dem Nachheizverfahren sollte die Qualität der Quantenfilmgrenzflächen verbessert werden. Es wurden die Kombinationen „keine Glättung“, „Glättung der ersten Grenzfläche“, „Glättung der zweiten Grenzfläche“ und „Glättung beider Grenzflächen“ mit Makro-Photolumineszenz-Messungen untersucht. Bei diesen Experimenten zeigte sich, dass die Temperaturerhöhung nach dem Wachsen des (011)-Quantenfilms keinen, diejenige vor dem Wachsen sogar einen negativen Effekt auf die detektierten Intensitäten und Linienbreiten hatte.

Eine Erklärung für die nicht beobachtete Verbesserung muss in den Unterschieden zwischen CEO- und gewöhnlichem [011]-Wachstum bzw. zwischen Makro- und Mikro-Photolumineszenz gesucht werden. So ist beim Überwachsen von Spaltflächen die kleine Fläche, auf der gewachsen wird, am Anfang perfekt glatt, während beim konventionellen Wachstum eine auf atomarer Skala raue GaAs-Halbleiterscheibe als Substrat dient. Auch gibt es einen leichten Unterschied in der Substrattemperatur, da diese – im Gegensatz zum Standardwachstum – beim CEO-Probenhalter nicht direkt am Ort der Probenstücke gemessen werden kann. Weiterhin ist zu berücksichtigen, dass man beim

Makro-Photolumineszenz-Experiment aufgrund der Fokusgröße von rund $300\text{ }\mu\text{m}$ über einen viel größeren Probenbereich mittelt.

Um genauere Aussagen zu ermöglichen, wurde in einem zweiten Schritt versucht, die von Yoshita *et al.* dargestellten Ergebnisse für eine unverspannte CEO-Struktur zu reproduzieren [Yos02]. Vorher ist jedoch in einem Einschub zu sehen, wie bei den Makro-Photolumineszenz-Messungen zusätzlich die Intensitäten von [100]- und [011]-Strukturen mit identischem Aufbau verglichen werden konnten.

Makro-Photolumineszenz-Spektren von [100]- und [011]-Strukturen

Allgemein ist es wünschenswert, wenn die in [011]-Richtung gewachsenen Quantenstrukturen eine ähnlich starke PL-Emission zeigen wie die des [100]-Wachstums. Dazu stellt Abbildung 84 zwei Spektren dar, die bei einer Temperatur von 2 K und einer Anregungsenergie von 1959,2 meV (Helium-Neon-Laser) aufgenommen wurden. Für beide Proben, die auf verschiedenen Haltern hergestellt wurden, sind die Signale des 7 nm breiten GaAs-Quantenfilms und des in Wachstumsrichtung darunter liegenden 500 nm dicken Übergitters (abwechselnd 3 nm GaAs und 7 nm $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$) zu sehen. Die unterschiedlichen spektralen Signalpositionen (25 bzw. 71 meV Differenz für die Quantenfilme bzw. Übergitter) folgen aus der anisotropen Masse der schweren Löcher (vergleiche [Yos01b] und Tabelle 1 auf Seite 38).

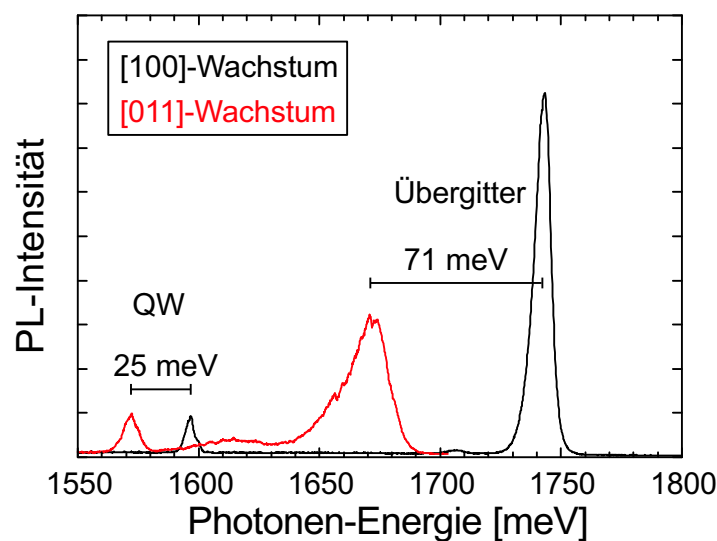


Abbildung 84: Vergleich der Makro-Photolumineszenz-Spektren zweier in der Schichtfolge identischer Strukturen, die in [100]- und [011]-Richtung ohne Grenzflächen-glättung gewachsen wurden.

Grundsätzlich fällt auf, dass die Photolumineszenz-Linien der $[011]$ -Strukturen breiter sind. So betragen die FWHM-Linienbreiten beim Quantenfilm- und beim Übergittersignal 7 und 20 meV gegenüber 4 und 8 meV für die entsprechenden $[100]$ -Strukturen. Während beim Übergitter das integrale Signal für beide Strukturen gleich ist, kann man beim Quantenfilm – bei gleicher Maximalintensität – sogar eine Steigerung der integralen Emission feststellen. Diese starke Lumineszenz ist für Proben vorteilhaft, bei denen die (011) -Quantenfilme wichtig für die Quantendrahtbildung sind.

Probenstruktur und Nachheizverfahren

Nun wird anhand von Abbildung 85 der Aufbau der CEO-Struktur (Identifikationsnummer: D040514A-b) für das Nachheizverfahren erklärt. Entlang der $[100]$ -Richtung folgt auf einen 300 nm dicken GaAs-Puffer ein $6,2\ \mu\text{m}$ breiter Bereich aus $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$, der eine beliebige funktionelle Schichtsequenz ersetzt. Um eine bessere Probenqualität zu erzielen, wurde hierbei nach jeweils 20,1 nm eine nur zwei Monolagen dicke Schicht aus GaAs abgeschieden (nicht gezeigt) und das Wachstum für 15 Sekunden unterbrochen. Eine GaAs-Decklage schließt die Schichtfolge ab.

Im zweiten Wachstumsschritt, der in der Skizze vertikal verläuft, wurde nur eine 7 nm breite GaAs-Lage abgeschieden. Es ist zu beachten, dass in diesem Fall die Wachstums-

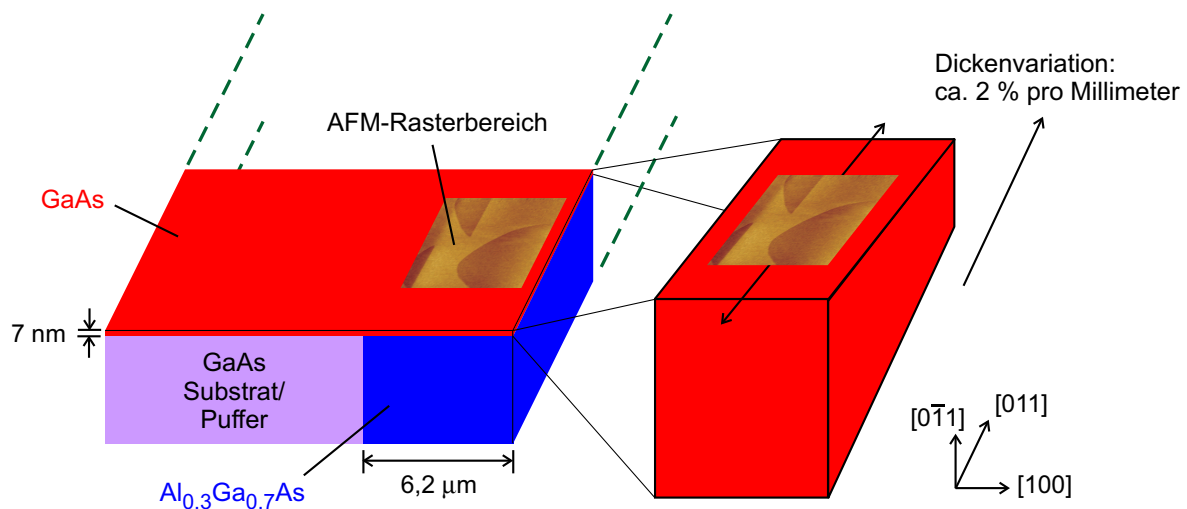


Abbildung 85: Skizze der mit dem Nachheizverfahren gewachsenen Probe. Die im Folgenden gezeigten AFM-Aufnahmen stammen von unterschiedlichen Positionen entlang der $[011]$ -Achse. In dieser Richtung ändert sich die Dicke der GaAs-Lage.

richtung parallel zur $[0\bar{1}1]$ -Kristallachse liegt. Der Einfluss der Orientierung wird am Ende des Abschnitts diskutiert. Beim Wachstum wurde die Probe nicht rotiert und war so ausgerichtet, dass die $[011]$ -Richtung entlang des Gallium-Flusses zeigte. Deshalb ändert sich die Dicke der CEO-Schicht pro Millimeter um etwa 2 %. Das hat den Vorteil, dass man AFM-Bilder an Stellen mit unterschiedlicher fraktionaler Monolagenbedeckung (Verhältnis der von den Atomen der obersten Monolage bedeckten Fläche zur Gesamtfläche) aufnehmen kann.

Aus den zuvor dargelegten Gründen erfolgte das $[0\bar{1}1]$ -Wachstum mit einer reduzierten Rate von $0,49 \mu\text{m/h}$ bei einer Temperatur von 475°C und unter hohem As_4 -Überdruck (etwa zweifacher Wert des für $[100]$ -Wachstum üblichen). Für den nun folgenden Nachheizschritt wurde der Arsen-Druck beibehalten und der Gallium-Fluss gestoppt. Um eine Reorganisation der Atome an der Oberfläche zu ermöglichen, benötigt man eine erhöhte Temperatur. Der Sollwert von 600°C wird nach etwa fünf Minuten erreicht und für zehn Minuten gehalten. Damit ist das Probenwachstum beendet. Wenn im Anschluss weitere Schichten abgeschieden werden sollen, ist eine Abkühlzeit von etwa zehn Minuten erforderlich.

Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen

Im vorliegenden Fall bestand der zweite Wachstumsschritt – wie bereits erwähnt – nur aus dem Abscheiden einer GaAs-Lage, um AFM-Aufnahmen der geglätteten GaAs-Oberfläche zu ermöglichen. Diese werden im Folgenden denen einer Referenzprobe (ohne Durchführung eines Nachheizschritts, Identifikationsnummer: D040514B-a) gegenübergestellt. Mit fortschreitender Dauer der an Luft durchgeführten Messungen lagerten sich zwar Partikel auf der Oberfläche ab, jedoch waren im Allgemeinen Degradationen (zum Beispiel durch Oxidation) vernachlässigbar.

Der abgerasterte Bereich der $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche hat immer eine Größe von $5 \times 5 \mu\text{m}^2$, wobei die $[100]$ -Richtung nach rechts aufgetragen ist. Die $[011]$ -Achse weist in den folgenden Abbildungen nach oben. Es ist jedoch zu beachten, dass diese Achse – anders als bisher – nicht die Richtung des zweiten Wachstumsschritts angibt, der hier $[0\bar{1}1]$ -orientiert ist. Alle gezeigten AFM-Bilder stammen von unterschiedlichen Positionen entlang der $[011]$ -Richtung und weisen somit verschiedene Monolagenbedeckungen auf. Dies ist in Abbildung 85 rechts in der vergrößerten Darstellung der GaAs-Lage illustriert, während die Skizze der Probenstruktur die Lage der AFM-Aufnahmen am Probenrand anhand eines Beispiels verdeutlicht.

In Abbildung 86(a) kann man die $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche der Referenzprobe sehen, die nicht geglättet wurde. Die Rauigkeiten sind offensichtlich groß und die ebenen Bereiche haben eine laterale Ausdehnung in der Größenordnung von 100 nm. Wie in allen weiteren Abbildungen gibt die gelbe Linie die Lage des unten dargestellten Höhenprofils wieder. Es sind Fluktuationen von $\pm 0,5$ nm zu erkennen, die bei einer Monolagendicke von 0,2 nm in $[0\bar{1}1]$ -Richtung Variationen um bis zu fünf Monolagen entsprechen. Diese Höhenverteilung erklärt zusammen mit der lateralen Größe der ebenen Bereiche die beobachteten großen Photolumineszenz-Linienbreiten bei CEO-Strukturen, die ohne Grenzflächenglättung gewachsen wurden. Auch stellt diese AFM-Aufnahme anschaulich dar, wie es zur Exziton-Lokalisierung kommen kann (vergleiche Kapitel 4.3).

Die Auswirkungen des Nachheizschritts sind nun unmittelbar in Teilbild (b) zu erkennen: Anstelle der ungeordneten Rauigkeiten bilden sich Inseln aus und die Höhe der Oberfläche variiert nur noch um zwei Monolagen. Im Querschnitt sind atomar glatte Plateaus von rund $1\text{ }\mu\text{m}$ Länge abgebildet. Die Tatsache, dass dort der Graph nicht horizontal verläuft, ist ein Artefakt, das unter anderem von den Nichtlinearitäten der Piezoröhre des Rasterkraftmikroskops herrührt. Jedoch werden die eingezeichneten Monolagenunterschiede davon nicht beeinflusst. Unter der etwas dunkleren Region auf der linken Seite befindet sich das GaAs-Substrat. Insgesamt verdeutlicht bereits dieses Bild, das aus einem Bereich stammt, in dem die Oberfläche vergleichsweise große Rauigkeiten zeigte, die Vorteile der Grenzflächenglättung.

Allgemein ist festzustellen, dass das verwendete Rasterkraftmikroskop für Reihenuntersuchungen, bei denen große Entfernungen zwischen den einzelnen Bereichen auftreten, nicht ideal ist. So stammen die in den Abbildungen 86 und 87 gezeigten Aufnahmen von Orten, die sich in ihrer Position entlang der $[011]$ -Richtung um bis zu 1,1 mm unterscheiden. Da sich jedoch die Probe mit Hilfe der Piezoelemente nur maximal um $120\text{ }\mu\text{m}$ verschieben lässt, mit zunehmenden Auslenkungen Drifteffekte auftreten und man für weite Verfahrswege auf eine manuelle Stellschraube angewiesen ist, kann eine Positionsangabe stets nur ungefähr erfolgen. So sind in Abbildung 86 zunächst auffällige Einzelbilder zu sehen, ehe in Abbildung 87 systematisch charakteristische Aufnahmen mit einer groben Ortsangabe gezeigt werden.

Vier Inseln, die sich jeweils nur an einer Stelle berühren, sind in Abbildung 86(c) zu erkennen. Derartige Inselketten mit Längen von einigen zehn Mikrometern wurden bisher nur in einem Bereich der Probe entdeckt. Die Ketten bilden die Grenze zwischen zwei Oberflächenbereichen, die sich in ihrer Höhe um eine Monolage unterscheiden. Aus dem horizontalen Schnitt geht hervor, dass die Inseln gegenüber den umliegenden Bereichen um eine bzw. zwei Monolagen erhöht sind. Teilbild (d) zeigt längliche, entlang

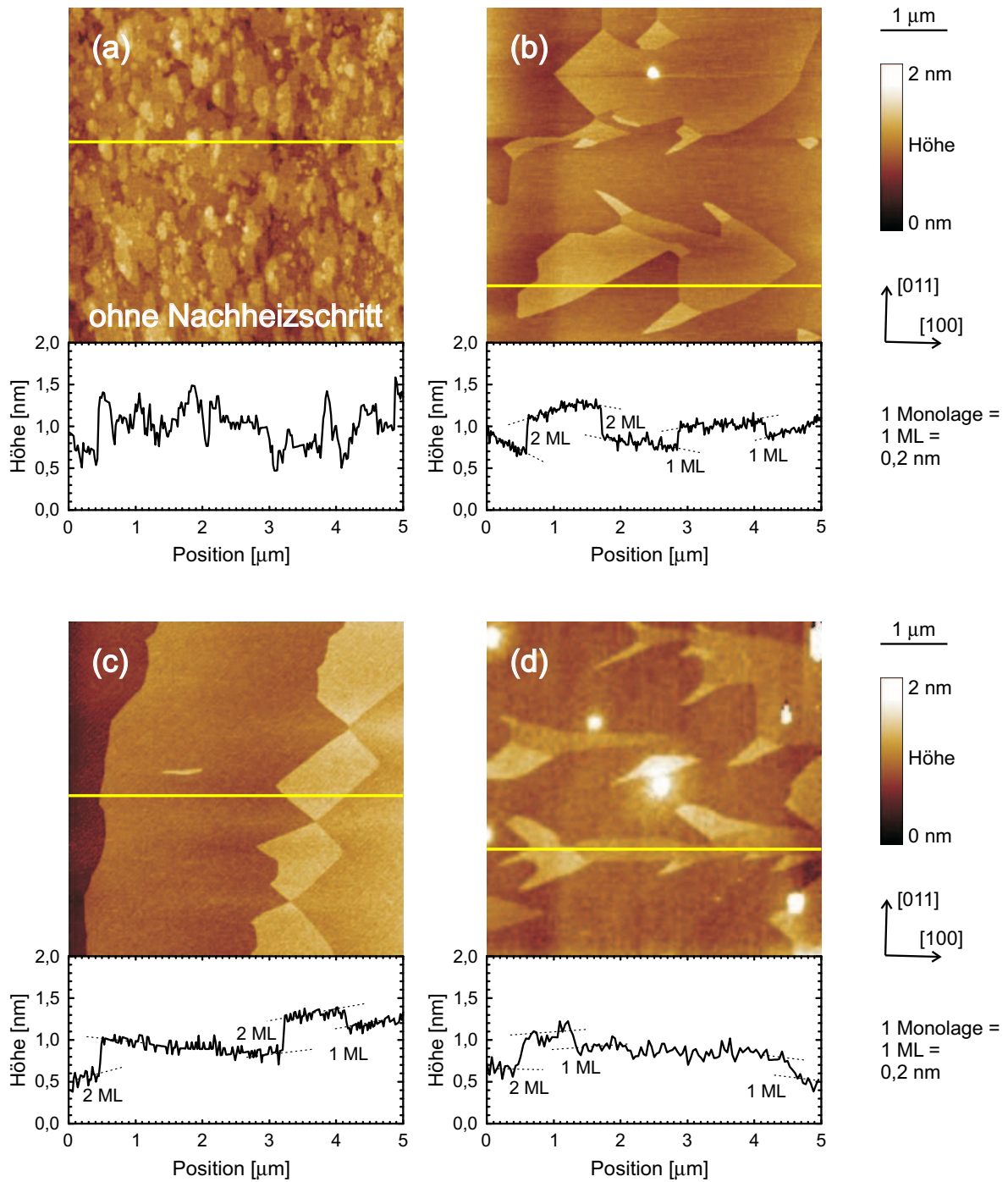


Abbildung 86: (a) Die AFM-Aufnahmen der $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche zeigen ohne Nachheisschritt starke Rauigkeiten. (b)-(d) Das Glättungsverfahren bewirkt eine Reduktion der Höhenfluktuationen und atomar glatte Plateaus auf Mikrometerskala. Die drei Bilder wurden an unterschiedlichen Positionen entlang der $[011]$ -Richtung aufgenommen (vergleiche Abbildung 85).

der [100]-Richtung orientierte Inseln. Deren Ausdehnung und Größe wird mit abnehmender Monolagenbedeckung kleiner, bis schließlich nur noch vereinzelte Strukturen übrig bleiben.

Mehrere dieser kleinen Inseln mit einer Höhe von zwei Monolagen kann man nun in Abbildung 87(a) sehen. Derartige Strukturen wurden auch von Yoshita *et al.* beobachtet und als „Boote“ bezeichnet [Yos02]. Während sich die Überschussatome nach dem Nachheizschritt in solchen schmalen Inseln organisieren, sorgen alle anderen Atome in diesem Probenbereich für eine atomar glatte Oberfläche. Grundlage für die Berechnung der fraktionalen Monolagenbedeckung ist eine gemessene Länge von 1,3 nm bis zur Wiederholung der Strukturen auf der Oberfläche nach einer Monolage. Die in der Abbildung angegebene Bedeckung von 0,15 unterliegt dabei den zuvor genannten Einschränkungen hinsichtlich der lateralen Positioniergenauigkeit des Rasterkraftmikroskops.

Abbildung 87(b) gibt die Höhenverteilung für eine Monolagenbedeckung von etwa 0,6 wieder. Hier haben sich die Inseln zu großen Terrassen verbunden und die Gräben besitzen eine Tiefe von einer Monolage. Diese von Yoshita *et al.* als „tropische Fische“ bezeichneten Vertiefungen haben rechts einen Rand, der exakt entlang der [011]-Richtung verläuft [Yos02].

Mit zunehmender fraktionaler Monolagenbedeckung werden die Gräben mit Atomen aufgefüllt. Die daraus resultierenden „tropischen Fische“ mit verringerter Fläche kann man in Teilbild (c) erkennen, zusammen mit zwei Monolagen tiefen Gräben, die ein kleineres Aspektverhältnis (Verhältnis der vertikalen [011]-Ausdehnung zur horizontalen [100]-Länge) aufweisen. Diese Gräben sind spiegelverkehrt zu den „Fischen“ orientiert und besitzen einen gekrümmten Rand auf der linken Seite.

Schließlich zeigt Abbildung 87(d) einen atomar perfekt glatten Ausschnitt der (0 $\bar{1}1$)-Probenoberfläche. Im Querschnitt ist nur noch das Rauschen des AFM-Signals zu sehen. Bei Rasterungen in [011]- und [100]-Richtung erstreckten sich derartig ebene Bereiche über Distanzen von 60 bzw. 100 μm . Damit sind diese perfekten Regionen viel größer als diejenigen GaAs-Oberflächen, die mit Molekularstrahlepitaxie im [100]-Wachstum hergestellt wurden [Hes94, Gam96, Wuq99]. Demzufolge ist während des Nachheizschritts von einer vergrößerten Atombeweglichkeit auszugehen. Insgesamt wird mit der in Teilbild (d) dargestellten idealen Oberfläche der Nutzen des Glättungsverfahrens eindrucksvoll demonstriert.

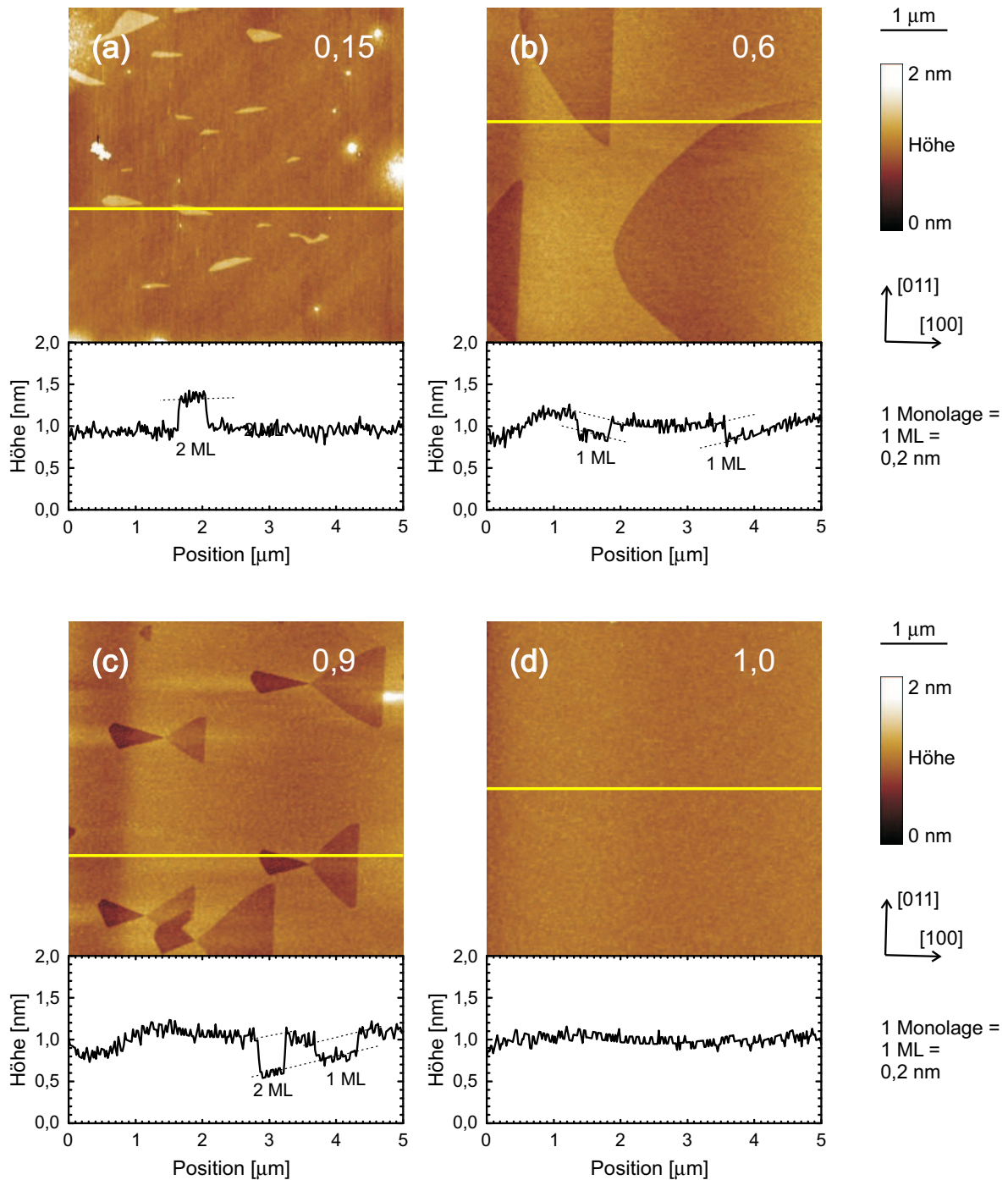


Abbildung 87: (a)-(c) Abhängig von der rechts oben angegebenen Monolagenbedeckung zeigen die AFM-Aufnahmen der $(0\bar{1}1)$ -Oberfläche auf atomar glatten Ebenen charakteristische Strukturen. Diese entstehen beim Nachheizschritt durch überschüssige bzw. fehlende Atome. (d) Im Idealfall ist die Oberfläche vollkommen eben. Die Bilder wurden an unterschiedlichen Positionen entlang der $[011]$ -Richtung aufgenommen (vergleiche Abbildung 85).

Folgerungen

Aus der Ausdehnung des ebenen Bereichs ergibt sich, dass die Atome während des Nachheisschritts Strecken von mehreren zehn Mikrometern zurücklegen können [Ohj03]. Die Glattheit der Oberfläche kann man durch Hochskalieren noch verdeutlichen: Wird Teilbild (b) auf eine $25 \times 25 \text{ m}^2$ große Fläche übertragen, haben die gezeigten „Fische“ eine Tiefe von 1 mm. Laut Referenz [Yos02] bleibt die Oberflächenmorphologie auch nach dem Wachsen einer Barriere erhalten.

Ein Modell, das – ausgehend von der Stabilität der Gallium- und Arsen-Atome an den Stufenkanten – die Formen der beobachteten Strukturen diskutiert, wurde von Oh *et al.* vorgestellt [Ohj03]. Da sich Einbau und Desorption von Arsen-Atomen bei einer Temperatur von 600°C im Gleichgewicht befinden, die Gallium-Desorption jedoch vernachlässigbar ist, bestimmt die Oberflächenbeweglichkeit der Gallium-Atome die Morphologie. Als treibende Kraft für die Reorganisation der Oberfläche liegt dem Modell das Bestreben der Atome zugrunde, Gitterplätze mit möglichst vielen Bindungen einzunehmen.

Mit dieser Theorie kann die Form der in den Abbildungen 87(b) und (c) beobachteten „Fische“ erklärt werden. Es zeigt sich, dass die lange vertikal verlaufende Seite stets von einer Reihe Gallium-Atome begrenzt wird, die den oberen Rand der Monolagenstufe bilden [Ohj03]. Diese Gallium-Atome gehören zu Gallium-Arsen-Bindungsketten, die bereits in Abbildung 1 auf Seite 4 blau und rot markiert wurden. Abbildung 88(a) wiederholt nun die Darstellung der GaAs-Elementarzelle unter Vernachlässigung aller Atome, die nicht Teil der hervorgehobenen Ketten sind. Wie bei der Vorzeichendiskussion der piezoelektrischen Konstanten in Abschnitt 2.7 bereits erläutert, verläuft auch hier die positive $[111]$ -Richtung vom Gallium- zum Arsen-Atom.

Teilbild (b) zeigt nun die Projektion auf die (001) -Fläche. In dieser Darstellung wird der Unterschied zwischen $(0\bar{1}1)$ - und (011) -Oberfläche klar: Weist die positive $[100]$ -Achse (Richtung des ersten Wachstumsschritts) nach rechts, sind für $[0\bar{1}1]$ -Wachstum die Gallium-Atome auf der linken Seite der Bindungsketten, während sie sich für $[011]$ -Wachstum auf der rechten Seite befinden. Da die eine Monolage tiefen „Fische“ von der Gallium-Atomreihe begrenzt werden, liegt im ersten Fall die lange vertikale Seite rechts, im zweiten Fall jedoch links, wie man auch in der Abbildung erkennen kann. Diese spiegelverkehrte Ausrichtung wurde experimentell verifiziert und hat wachstumsrelevante Auswirkungen: Je nachdem, ob sich die lange vertikale Seite rechts oder links befindet, lassen sich auf der Seite des epitaktischen Wachstums (rechts, in $[100]$ -

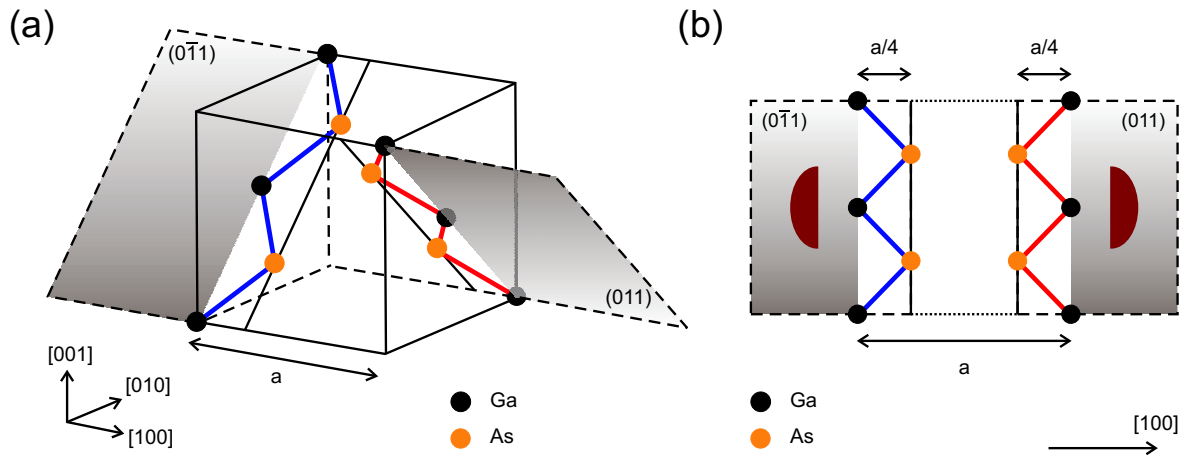


Abbildung 88: (a) Gallium-Arsen-Bindungsketten innerhalb der GaAs-Elementarzelle. (b) Die Projektion auf die (001) -Fläche zeigt, dass sich die Gallium-Atome innerhalb der $(0\bar{1}1)$ - bzw. (011) -Spaltfläche in der Bindungskette links bzw. rechts befinden. Dieser Unterschied legt die Orientierung der braun angedeuteten „Fische“ fest und hat wichtige Konsequenzen für die erzielbaren Oberflächenmorphologien.

Richtung) oder auf der Seite des Substrats (links, in $[\bar{1}00]$ -Richtung) atomar glatte Flächen wie in Abbildung 87(d) erzielen, während an der jeweils anderen Probenkante stets Stufen vorliegen [Rei04]. Aus dieser experimentellen Erkenntnis folgt das wichtige Ergebnis, dass für die hier definierte Kristallorientierung das gewählte Wachstum auf der $(0\bar{1}1)$ -Spaltfläche gegenüber der (011) -Ausrichtung von Vorteil ist. Demnach muss insbesondere bei Proben mit Grenzflächenglättung die Orientierung beim zweiten Wachstumsschritt beachtet werden.

Der Einfluss der Nachheiztemperatur wurde von Yoshita *et al.* untersucht [Yos01a]. Es zeigt sich, dass zwar bei 510°C die Inselgröße schon zunimmt, es jedoch immer noch einen Unterschied von vier Monolagen zwischen tiefster und höchster Stelle gibt. Erst ab einer Temperatur von 560°C sind große, atomar glatte Bereiche zu beobachten. Die Tatsache, dass die Grenzflächenglättung auch mit Temperaturen unterhalb 600°C erfolgreich sein kann, ist für die in dieser Arbeit untersuchten verspannten Strukturen von großer Wichtigkeit, da die Wahrscheinlichkeit einer Diffusion der Indium-Atome mit der Temperatur steigt. Um bei der noch ausstehenden Übertragung des Nachheizverfahrens auf verspannte Probenstrukturen das für die Quantendrahtbildung wichtige Verzerrungsprofil nicht zu zerstören, muss die Temperaturerhöhung moderat ausfallen.

Falls sich das Glättungsverfahren auch für rein verspannungsinduzierte Quantendrahtstrukturen bewährt, wird die hochauflösende optische Spektroskopie eine Vielzahl

weiter gehender Untersuchungen erlauben. Dabei ist die Tatsache wichtig, dass die laterale Ausdehnung der atomar glatten Plateaus größer als der Fokusbereich des anregenden Lasers ist. Wie schon von Akiyama *et al.* für unverspannte Systeme gezeigt wurde, sind auch hier FWHM-Linienbreiten zu erwarten, die mit etwa 1 meV rund eine Größenordnung unter der augenblicklichen liegen [Aki02]. Damit bieten sich neue Möglichkeiten zur Untersuchung gebundener Exziton-Systeme. Basierend auf dem Nachheizverfahren konnte im Materialsystem GaAs/AlGaAs bereits eine Laserstruktur realisiert werden, die auf einem einzelnen Quantendraht beruht [Hay02]. Dies schafft günstige Perspektiven für ein verspannungsinduziertes Quantendrahtlasersystem.

8.2 Simulation alternativer Strukturen

Die im Weiteren vorgestellten Konzepte sind augenblicklich noch nicht realisiert. Ein erster Vorschlag ist, das in dieser Arbeit für Quantendrähte diskutierte Verspannungsschema auf nulldimensionale Systeme anzuwenden.

Wegscheider *et al.* stellten im Jahr 1997 erstmals unverspannte Quantenpunkte durch zweifaches Überwachsen von Spaltflächen her [Weg97b]. In einer Erweiterung des in Abbildung 26 auf Seite 61 dargestellten Verfahrens diente dabei ein zweiter *In-situ*-Spaltvorgang dazu, eine (0 $\bar{1}1$)-Fläche freizulegen, auf der die Schichten des dritten Wachstumsschritts abgeschieden wurden. An der Kreuzung dreier je 7 nm breiter GaAs-Quantenfilme, die sich in [100]-, [011]- und [0 $\bar{1}1$]-Richtung zwischen Al_{0,35}Ga_{0,65}As-Barrieren befinden, bildet sich in dieser unverspannten Struktur ein nulldimensionaler Quantenpunkt. Zur Absenkung der Grundzustandsenergie im Kreuzungsbereich kommt es, weil – analog zu den Betrachtungen auf Seite 11 – dort den Wellenfunktionen ein größeres Volumen zur Verfügung steht.

Eine Modellstruktur, in der der Quantenpunkt rein verspannungsinduziert gebildet wird, ist in Abbildung 89 zu sehen. Die InAlAs-Schichten, die in [100]- und [011]-Richtung zwischen AlGaAs-Barrieren liegen, sorgen für die tensile Verspannung im System. Wie in Kapitel 3.3 erläutert und in Kapitel 7.3 nachgewiesen, entstehen entlang der Schnitte der Verzerrungslagen mit dem überwachsenen (0 $\bar{1}1$)-Quantenfilm rein verspannungsinduzierte Quantendrähte (QWR₁₀₀ und QWR₀₁₁, engl.: quantum wire). Aus den gleichen Gründen ist davon auszugehen, dass sich direkt an der Kreuzung der InAlAs-Schichten im GaAs-Quantenfilm ein rein verspannungsinduzierter Quantenpunkt bildet, da die GaAs-Lage hier in zwei Richtungen tensil verzerrt wird. Aufgrund der Resultate der vorliegenden Arbeit lässt dieses Strukturkonzept eine im Vergleich

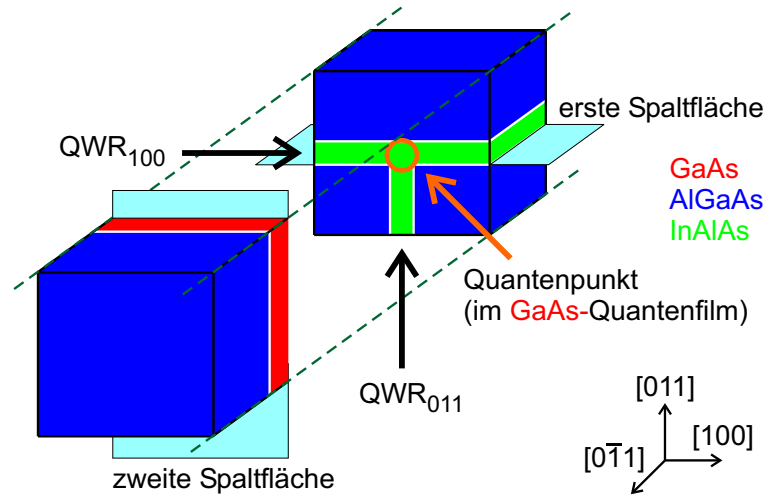


Abbildung 89: Im GaAs-Quantenfilm entsteht an der Kreuzung zweier InAlAs-Lagen rein verspannungsinduziert ein Quantenpunkt. Damit die Schichten des dritten Wachstumsschritts in $[0\bar{1}1]$ -Richtung die (100) - und (011) -Lagen nicht verdecken, setzt sich die Struktur in der Skizze aus zwei Teilen zusammen.

mit dem unverspannten Quantenpunktsystem erhöhte Einschlussenergie (bezüglich des Quantendrahts) erwarten.

Während die Simulationen der verspannungsinduzierten Quantenpunkte noch durchgeführt werden müssen, basieren die folgenden Modellstrukturen für Quantendrähte auf Rechnungen mit dem Programm **nextnano**³. Diese Konzepte bilden unter anderem die Grundlage für Proben, deren Einschlussenergien bei verbesserter Lumineszenzausbeute noch größer sind als die in der vorliegenden Arbeit präsentierten.

Alle bislang diskutierten Quantendrähte wurden auf GaAs-Substraten gewachsen. In einem alternativen Ansatz wird das bewährte Schema auf InP-Substrate übertragen. Dieses Material besitzt ungefähr die gleiche Gitterkonstante wie $\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ und $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$. Um wieder verspannungsinduzierte Quantendrähte zu erhalten, sind folgende Veränderungen erforderlich: Das neue Barrierenmaterial ist $\text{In}_{0,53}\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,33}\text{As}$, während die Verspannungsschicht nun aus $\text{In}_{0,69}\text{Al}_{0,31}\text{As}$ besteht. Beim (011) -Quantenfilm verwendet man $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$.

Die für eine solche Struktur durchgeführten Simulationen ergaben Verzerrungsverteilungen, die denen aus den Abbildungen 13, 14 und 15 (Seiten 43 bis 46) sehr ähnlich sind. Für die symmetrische $10 \times 10 \text{ nm}^2$ -Kreuzung beträgt die berechnete Einschlussenergie $31,7 \text{ meV}$. Der Wert ist somit kleiner als die $48,6 \text{ meV}$, die für die Referenzstruktur aus Abschnitt 3.3 ermittelt wurden. Dieses Ergebnis lässt sich mit Hilfe von

Tabelle 1 auf Seite 38 verstehen, da aufgrund des Indium-Anteils in der überwachsenen Schicht die absoluten Deformationspotentiale kleiner als in reinem GaAs sind. Deswegen folgen auch geringere Energieverschiebungen im Leitungs- und im Valenzband. Hinzu kommt, dass die Verspannungen von der Gitterkonstante der Barriere abhängen. Falls diese – wie im vorliegenden Fall – gegenüber der Referenzstruktur vergrößert ist, bewirkt ein bezüglich des umgebenden Materials um 16 % erhöhter Indium-Anteil eine kleinere relative Verzerrung.

Diese auf InP aufbauende Struktur erlaubt dennoch eine Erhöhung der Einschlussenergie. So kann in $[100]$ -Richtung eine näherungsweise verspannungskompensierte Sequenz aus 10 nm breiten $\text{In}_{0,69}\text{Al}_{0,31}\text{As}$ -Lagen, die zwischen 40 nm dicken Barrieren aus $\text{In}_{0,48}\text{Al}_{0,16}\text{Ga}_{0,36}\text{As}$ eingebettet sind, gewachsen werden. Als Material für den (011) -Quantenfilm verwendet man dann zum Beispiel $\text{In}_{0,48}\text{Ga}_{0,52}\text{As}$. Somit wird die tensile Verzerrung an der Grenzfläche zur Verspannungsschicht vergrößert. Dies äußert sich unmittelbar in der Einschlussenergie, die nun 47,0 meV beträgt.

Eine andere gezielte Modifikation der in Kapitel 3.3 behandelten Referenzstruktur sorgt für einen erhöhten Überlapp zwischen Elektron- und Lochwellenfunktion. Dieses Konzept (vergleiche Abbildung 90) basiert darauf, dass sich das resultierende Verzerrungsprofil nicht wesentlich ändert, wenn man in der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Verspannungsschicht die

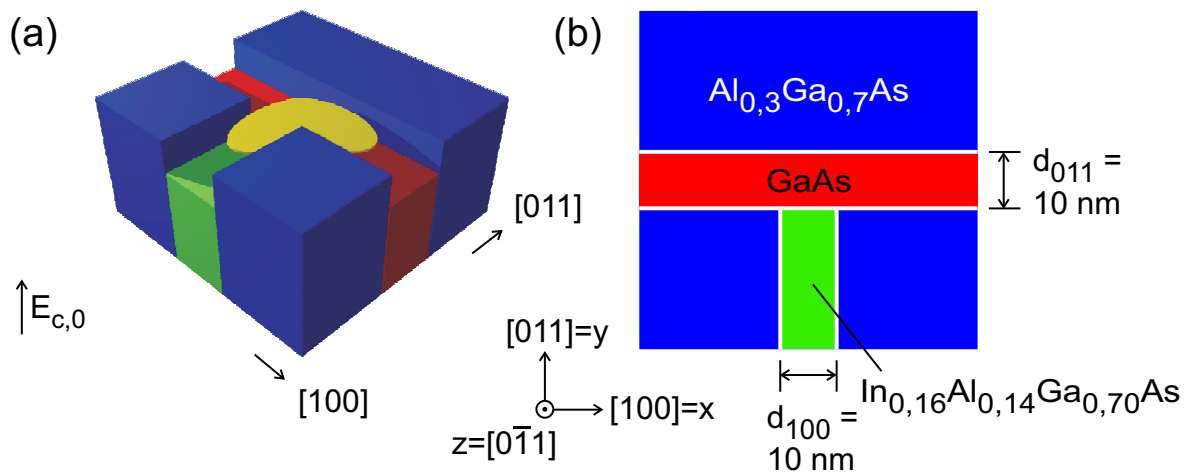


Abbildung 90: (a) Schematischer Bandkantenverlauf an der Kreuzung einer InAlGaAs -Verspannungsschicht mit einem überwachsenen Quantenfilm. Die Elektronenwellenfunktion ist gelb angedeutet. (b) Quantendrahtstruktur mit einer 10 nm breiten verspannten $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,70}\text{As}$ -Lage und einem ebenfalls 10 nm dicken GaAs -Quantenfilm.

Aluminium-Atome sukzessive durch Gallium-Atome ersetzt und dabei alle anderen Probenparameter unverändert lässt. Auswirkungen ergeben sich jedoch auf die Bandlücke, die immer kleiner wird. Auf diese Weise erfolgt eine Annäherung an gewöhnliche T-förmige Strukturen. So werden die Vorteile der rein verspannungsinduzierten Quantendrahtbildung mit der zusätzlichen Energieabsenkung kombiniert, die sich aufgrund des größeren zur Verfügung stehenden Volumens an T-Kreuzungen ergibt. Abbildung 90 veranschaulicht den Verlauf der Leitungsbandkante und die Probengeometrie dieses modifizierten verspannten Quantendrahtsystems, das die unverspannte Struktur aus Abbildung 4 (Seite 11) mit der rein verspannungsinduzierten Probe aus Abbildung 12 (Seite 41) vereint. Für eine derartige Quantendrahtstruktur wurde in einer weiteren Simulationsreihe mit dem Programm **nextnano**³ der Gallium-Anteil x in der verspannenden $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84-x}\text{Ga}_x\text{As}$ -Schicht schrittweise erhöht.

Der größte Überlapp von Elektron- und Schwerlochwellenfunktionen wird bei $x = 0,70$ erreicht. Die zugehörigen, auf den Maximalwert eins normierten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten (Betragsquadrate der einhüllenden Wellenfunktionen) sind in Abbildung 91 zu sehen. Während sich für Schwer- und Leichtloch keine merklichen Änderungen im Vergleich zu Abbildung 19 auf Seite 51 ergeben, können sich die Elektronen jetzt auch in der Verspannungsschicht aufhalten. Die Auftragung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit hat eine L-förmige Gestalt. Es ist wichtig anzumerken, dass im Bereich der optimalen

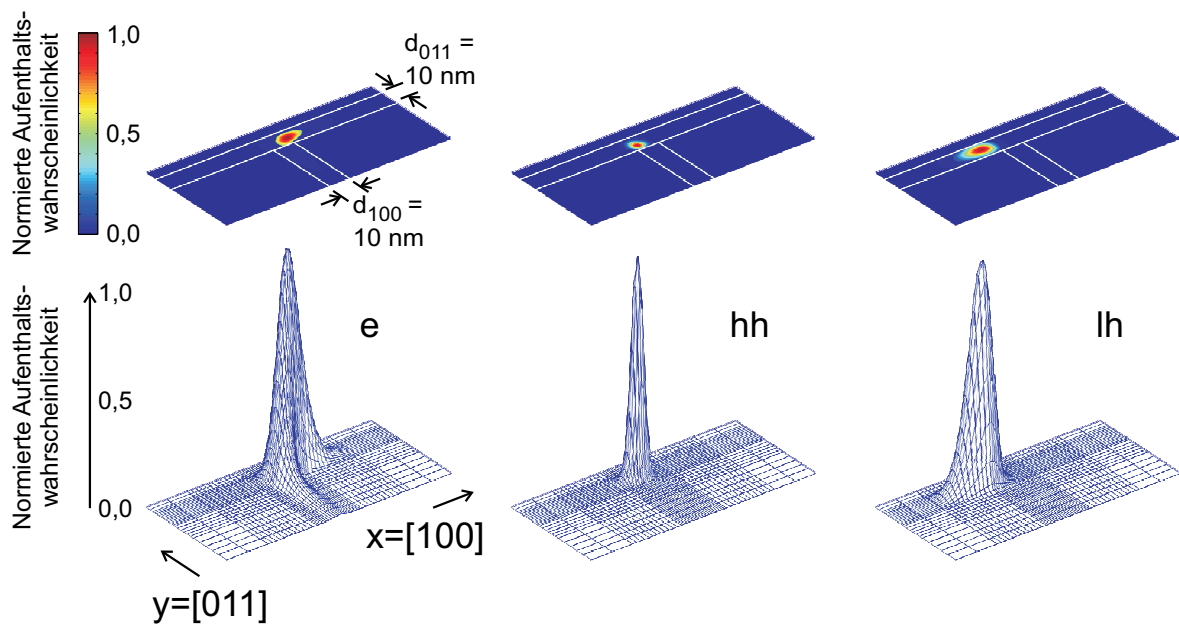


Abbildung 91: Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektron (e), Schwerloch (hh) und Leichtloch (lh) an der verspannten T-Kreuzung in der Struktur aus Abbildung 90(b).

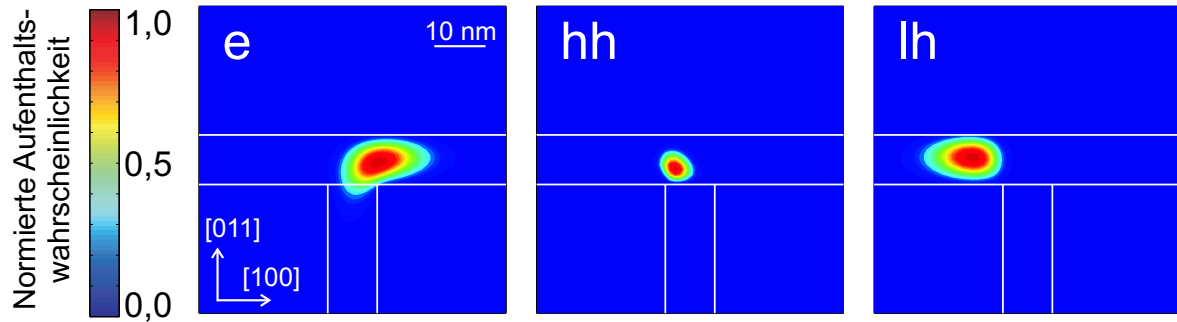


Abbildung 92: Konturdiagramm der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für Elektron (e), Schwerloch (hh) und Leichtloch (lh) an der verspannten T-Kreuzung in der Struktur aus Abbildung 90(b).

Zusammensetzung die Wellenfunktion sehr empfindlich auf Variationen des Gallium-Gehalts x reagiert.

Die zweidimensionale Darstellung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten wird in Abbildung 92 wiederholt. Hier kann man erkennen, dass für die optimale Verspannungslage aus $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,70}\text{As}$ der Überlapp zwischen Elektron- und Schwerlochwellenfunktion im Vergleich zur Referenzstruktur (vergleiche Abbildung 20 auf Seite 51) deutlich erhöht ist. In der damit einhergehenden Steigerung der Lumineszenzausbeute liegt der große Vorteil des vorgeschlagenen Konzepts, bei dem die Einschlussenergie mit 47,0 meV gegenüber der Referenzstruktur nahezu unverändert bleibt.

Bei konstantem $d_{100} = 10$ nm des überwachsenen Quantenfilms lässt sich die Einschlussenergie durch eine Verbreiterung der verspannenden $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,70}\text{As}$ -Schicht jedoch erhöhen. Begrenzt wird die Optimierung durch die kritische Dicke, bei der eingebaute Versetzungen das Verzerrungsprofil zerstören (vergleiche Diskussion zu Abbildung 23 auf Seite 56). Wenn es jedoch gelingt, 24 nm breite verspannte $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,70}\text{As}$ -Lagen auf $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ zu wachsen, dann können gemäß den Simulationen Quantendrahtstrukturen mit einer Einschlussenergie von 108 meV hergestellt werden.

8.3 Zusammenfassung

Dieses Kapitel widmete sich Themen, die für die Weiterentwicklung verspannter Quantendrahtsysteme von Bedeutung sind. Zunächst wurde gezeigt, dass man die Rauigkeiten an der (011)-Grenzfläche zwischen GaAs-Quantenfilm und Barriere mit einem

Nachheisschritt drastisch reduzieren kann. So ließen sich mit dem Rasterkraftmikroskop atomar glatte Plateaus mit einer Ausdehnung von mehreren zehn Mikrometern beobachten. Von dem idealen Resultat perfekt ebener Grenzflächen werden zukünftige Experimente profitieren: Geringe Linienbreiten erlauben die Auflösung einzelner Linien in den Spektren (beispielsweise gebundener Exziton-Paare), die dann bis zu höheren Temperaturen spektroskopiert werden können.

Der Unterschied zwischen der (011)- und (0 $\bar{1}1$)-Ausrichtung für den zweiten Wachstumsschritt wurde diskutiert. Daraus ergab sich das wichtige Ergebnis, dass nur mit der letzteren Orientierung perfekte Grenzflächen in dem Bereich der Probe möglich sind, der (in [0 $\bar{1}1$]-Richtung) oberhalb der epitaktischen Schichten des ersten Wachstumsschritts liegt.

Ein Schema für eine verspannte Quantenpunktstruktur wurde vorgestellt. Zudem zeigten Simulationen, dass sich das Konzept verspannungsinduzierter Quantendrähte – bei jedoch verringerten Einschlussenergien – auch auf InP-Substrate übertragen lässt. Mit diesem Materialsystem ist es möglich, im [100]-Wachstum eine verspannungskompensierte Abfolge aus Barrieren und Verzerrungsschichten zu wachsen und so die im Vergleich zu GaAs-Substraten zunächst reduzierte Einschlussenergie wieder zu erhöhen.

Ausgehend von dem in Kapitel 7 intensiv untersuchten Quantendrahtsystem wurde berechnet, dass der Überlapp zwischen Elektron- und Schwerlochwellenfunktion durch die Verwendung von $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,70}\text{As}$ als Verspannungsschicht erhöht werden kann. Diese Struktur kombiniert die Vorteile herkömmlicher T-förmiger und rein verspannungsinduzierter Quantendrähte und lässt höchste Einschlussenergien bei gleichzeitig verbesserter Lumineszenzausbeute möglich erscheinen.

9 Zusammenfassung

Die hohe räumliche und spektrale Auflösung des im Rahmen der vorliegenden Arbeit aufgebauten Mikro-Photolumineszenz-Messplatzes erlaubt das Identifizieren und Charakterisieren einzelner niedrigdimensionaler Quantenstrukturen. Der Nachweis neuartiger, rein verspannungsinduzierter Quantendrähte, mit denen das Ziel eines starken Ladungsträgereinschlusses erreicht wurde, bildet den Mittelpunkt der spektroskopischen Untersuchungen. Mit den gemessenen hohen Einschlussenergien ist es möglich, die Vorteile der eindimensionalen Quantensysteme voll zu nutzen. Zusätzlich zu den optischen Experimenten, mit denen sich die Eigenschaften der rein verspannungsinduzierten Quantendrähte erstmalig bestimmen ließen, werden die neuen Einschlusskonzepte auch mit dem Programm **nextnano**³ simuliert und optimiert.

Alle eindimensionalen Quantendrahtsysteme wurden mit Molekularstrahlepitaxie durch Überwachsen von Spaltflächen hergestellt. So können die Dicken aller Schichten präzise kontrolliert und Halbleiternanostrukturen mit genau bekannter Geometrie verwirklicht werden. Herkömmliche T-förmige Quantendrähte bilden sich an der Kreuzung zweier Quantenfilme, die parallel zu den (100)- und (011)-Kristallebenen orientiert sind. Grundlegend für den quantenmechanischen Entstehungsprozess ist die Energieabsenkung durch das größere Volumen, das den Wellenfunktionen von Elektronen und Löchern an der Kreuzung zur Verfügung steht. Für einen starken Ladungsträgereinschluss muss die Differenz zwischen der kleineren der beiden Übergangsenergien der Quantenfilme und der des Quantendrahts möglichst groß sein. In dieser Einschlussenergie E_c ist auch die Exziton-Bindungsenergie enthalten, deren Wert mit abnehmen der Dimension steigt.

Den Ausgangspunkt für den Optimierungsprozess von E_c stellt eine unverspannte Quantendrahtstruktur dar, bei der zwei GaAs-Quantenfilme in eine $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ -Barriere eingebettet sind. Vergrößerte Einschlussenergien können durch den gezielten Einbau von Verspannungen in die Quantendrahtstruktur realisiert werden. Dabei nutzt man die Tatsache, dass Verzerrungen im Kristall über die Deformationspotentiale zu Bandverschiebungen und -aufspaltungen führen. Im vorliegenden Fall sorgen Schichten aus InAlAs für die nötige tensile Verspannung im System. Als Konsequenz entstehen die Quantendrähte rein verspannungsinduziert und nicht – wie bei herkömmlichen Proben – aufgrund der Barrieren der Heterostruktur.

Konkret wurden die Komponenten des Verzerrungstensors für eine Struktur berechnet, bei der ein Quantendraht innerhalb eines 10 nm breiten GaAs-Quantenfilms an der

Kreuzung mit einer 10 nm dicken Verspannungsschicht aus $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ entsteht. Dabei überträgt sich die tensile Verzerrung gegenüber der $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ -Barriere auf den überwachsenen Quantenfilm. Besondere Bedeutung kommt hier der Tatsache zu, dass $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ für Elektronen und Löcher im GaAs-Quantenfilm als Barriere wirkt. So sind keine zusätzlichen Barrierenschichten auf der Spaltfläche erforderlich, welche die Verspannungseffekte reduzieren würden.

Der durch die Verzerrungen modifizierte ortsabhängige Verlauf der Leitungs- und Valenzbandkanten führt zu Elektron- und Lochwellenfunktionen, die sich von denen in herkömmlichen Quantendrähten unterscheiden. Bei diesen unverspannten Strukturen spiegelt sich die T-förmige Symmetrie in den Aufenthaltswahrscheinlichkeiten wider, wobei jedoch die richtungsabhängigen effektiven Lochmassen zu beachten sind. In den verspannten Systemen sorgt die gewählte Probenstruktur dafür, dass alle Wellenfunktionen innerhalb des überwachsenen Quantenfilms liegen. Zusätzlich werden Elektronen und Löcher aufgrund des Piezoeffekts räumlich voneinander getrennt. Als Ergebnis der Simulation für die zuvor angegebene Struktur wird eine Einschlussenergie von 48,6 meV vorausgesagt.

Die experimentelle Überprüfung der berechneten Verspannungen ist mit Röntgenstrahlung hoher Brillanz möglich. So wurde das Verzerrungsprofil einer Probe, die 50 verspannte Kreuzungen enthält, mit Röntgenbeugung unter streifendem Einfall untersucht. Da sich diese Methode durch ihre Oberflächenempfindlichkeit auszeichnet, kann man die Verzerrungen in den Lagen des zweiten Wachstumsschritts individuell bestimmen. Die Kombination radialer und angularer Aufnahmen weist eindeutig Verspannungsmodulationen innerhalb der überwachsenen Schicht nach und bestätigt so die Simulationsergebnisse. Auch die Schichtdicken entsprechen den nominellen Werten.

Mit dem Mikro-Photolumineszenz-Aufbau wurde zunächst ein $4 \times 4 \text{ nm}^2$ großer unverspannter Einfach-Quantendraht identifiziert. Die dabei bestimmte Einschlussenergie von 19 meV bleibt nahezu unverändert, wenn Messungen mit verschiedenen Anregungsleistungen durchgeführt werden. Grenzflächenrauigkeiten auf der Skala des Exziton-Bohrradius erzeugen natürliche Quantenpunkte mit einer Potentialtiefe von rund 2 meV bezüglich des Quantendrahts. Die strahlende Rekombination der an den Monolagenfluktuationen lokalisierten Exzitonen macht sich in den Photolumineszenz-Spektren durch überlagerte scharfe Spitzen bemerkbar. Diese Signaturen verschwinden mit steigender Temperatur aufgrund der thermischen Anregung aus den Potentialminima.

Erste hochauflösende Messungen an der verspannten Struktur mit 50 nahe aneinander liegenden $\text{In}_{0,1}\text{Al}_{0,9}\text{As}$ -Lagen zeigten, dass die Verzerrungen die überwachsene

Schicht nicht nur in unmittelbarer Nähe der Spaltfläche beeinflussen. Trotz einiger Indizien war hier noch keine eindeutige Identifikation von Quantendrähten möglich, die durch Verspannungen entstehen, da die Probengeometrie für die Röntgenmessungen ausgelegt wurde.

Der direkte Nachweis rein verspannungsinduzierter Einfach-Quantendrähte gelang mit Probenstrukturen, bei denen die $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Lagen einen Abstand von $1\text{ }\mu\text{m}$ besitzen. Diese erste erfolgreiche Realisierung des neuen Quantendrahtkonzepts, das auch numerisch simuliert wurde, bildet das Zentrum der Untersuchungen. Die durchgeführten Mikro-Photolumineszenz-Rasterungen identifizieren dabei individuelle Quantendrähte. Grundlage hierfür ist die exakte Kenntnis der Probengeometrie durch das präzise Wachstum. An den erwarteten Stellen werden lokal eingeschränkte Photolumineszenz-Signale detektiert. Genau an den Positionen der Quantendrähte wird die Emission der Quantenfilme unterdrückt. Dieser Effekt, der die getroffene Zuordnung untermauert, beruht darauf, dass für Ladungsträger im Quantenfilm, die sich in der Nähe der Verspannungsschicht befinden, der Quantendraht eine attraktive Energiesenke darstellt. Das Vorliegen von Quantendrähten wird außerdem durch die gemessene Polarisationsabhängigkeit unterstützt. Weitere verspannungsinduzierte Quantendrähte, die jedoch nur eine sehr schwache Photolumineszenz-Emission zeigen, konnten 40 nm von der Spaltkante entfernt beobachtet werden.

Generell ist trotz der geringeren Querschnittsfläche der Quantendrähte die Stärke ihrer Photolumineszenz-Signale mit der Intensität der Quantenfilmemission vergleichbar. Anders als beim unverspannten Quantendraht weisen die Spektren nur glatte Linienformen auf. Hierfür sind Monolagenfluktuationen verantwortlich, die auf einer Skala auftreten, die kleiner als der Exziton-Bohrradius ist. Diese Grenzflächenrauigkeiten, die eine Exziton-Lokalisierung verhindern, werden von den Indium-Atomen der Verspannungslage verursacht, welche durch Diffusion die Grenzflächenbeschaffenheit beeinflussen.

Die experimentell bestimmten Einschlussenergien E_c nehmen systematisch mit der Dicke d_{100} der $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,84}\text{As}$ -Verspannungsschicht zu. Wird d_{100} von 8 auf 15 nm vergrößert, so steigt E_c von 22 auf 43 meV , wenn die überwachsene GaAs-Lage 7 nm breit ist. Beträgt die Breite des GaAs-Quantenfilms 10 nm , nimmt E_c von 23 auf 41 meV zu, wenn man d_{100} von 8 auf 12 nm vergrößert. Höchste Einschlussenergien von bis zu $51,5\text{ meV}$ lassen sich bei kleinen Anregungsleistungen beobachten. Für Quantendrähte, die durch Überwachsen von Spaltflächen hergestellt wurden, liegt der im Rahmen dieser Arbeit erzielte Wert nur $2,5\text{ meV}$ unter dem größten bisher gemessenen.

Wegen der einfachen Modellannahmen sind die experimentell bestimmten Absolutwerte deutlich kleiner als die berechneten. Die Simulationen geben aber die grundsätzlichen Abhängigkeiten von den Schichtdicken gut wieder, so dass sich die Experimente mit den durchgeführten Rechnungen in Einklang befinden. Mit Hilfe des Piezoeffekts kann die Abhängigkeit der ermittelten Einschlussenergien von der Anregungsleistung erklärt werden. Aus den Simulationen folgt, dass die piezoelektrischen Polarisationsladungen nicht nur Elektronen und Löcher räumlich trennen, sondern auch zu einer Vergrößerung von E_c beitragen. Abschirmfelder bei stärkerer Anregung vermindern diesen Effekt. Die Rechnungen zeigen auch, dass grundsätzlich noch höhere Einschlussenergien möglich sind, da diese mit dem Indium-Anteil in der Verspannungsschicht steigen.

Bei der weiteren Strukturoptimierung muss jedoch beachtet werden, dass die kritische Schichtdicke den Einbau von Verspannungen und damit die erreichbare Einschlussenergie begrenzt. Zudem stellen die Verspannungsschichten Schwachstellen beim Spaltvorgang dar, wie aus Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen hervorgeht. Zusätzlich zu den genannten Beschränkungen limitiert die örtliche Trennung von Elektron- und Lochwellenfunktion die Lumineszenzausbeute. Diese kann jedoch durch die Verwendung von $\text{In}_{0,16}\text{Al}_{0,14}\text{Ga}_{0,70}\text{As}$ als Verzerrungsschicht erhöht werden. So zeigen die Simulationen einen vergrößerten Überlapp von Elektron- und Lochwellenfunktion, da die vorgeschlagene Struktur die Vorteile verspannungsinduzierter und T-förmiger Quantendrähte vereint.

Ein Nachheizverfahren verspricht für die Zukunft eine bessere Qualität der zweiten Quantenfilmgrenzfläche im [011]-Wachstum. Aufgrund der drastisch verringerten Rauigkeiten erwartet man kleinere Photolumineszenz-Linienbreiten und eine Abnahme der nichtstrahlenden Rekombination. Neben dem für das Probenwachstum wichtigen Unterschied zwischen (011)- und (0 $\bar{1}1$)-Orientierung zeigen erste Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen vor allem atomar glatte Grenzflächen, die sich über mehrere zehn Mikrometer erstrecken. Dieses ideale Ergebnis der Vorversuche bildet die Erfolg versprechende Basis für Strukturen höchster Qualität.

Die Methode der Mikro-Photolumineszenz stellt auch für zukünftige Proben ein mächtiges Werkzeug zur Identifizierung und Charakterisierung einzelner Quantendrähte dar und trägt so zur weiteren Entwicklung niedrigdimensionaler Quantenstrukturen in Richtung Raumtemperatur-Anwendungen bei.

Liste der verwendeten Abkürzungen

AFM	Rasterkraftmikroskop (atomic force microscope)
CCD	„ladungsgekoppeltes Bauelement“ (charge-coupled device)
CEO	Überwachsen von Spaltflächen (cleaved edge overgrowth)
FWHM	volle Halbwertsbreite (full width at half maximum)
GID	Röntgenbeugung unter streifendem Einfall (grazing incidence diffraction)
PL	Photolumineszenz (photoluminescence)

e	Elektron (electron)
hh	Schwerloch (heavy hole)
lh	Leichtloch (light hole)

GaAs	Galliumarsenid
AlAs	Aluminiumarsenid
InAs	Indiumarsenid
AlGaAs	Aluminiumgalliumarsenid
InGaAs	Indiumgalliumarsenid
InAlAs	Indiumaluminiumarsenid
InAlGaAs	Indiumaluminiumgalliumarsenid
AlP	Aluminiumphosphid
InP	Indiumphosphid
InGaAsP	Indiumgalliumarsenidphosphid

QW	Quantenfilm (quantum well)
aQW	zusätzlicher Quantenfilm (additional quantum well)
QWR	Quantendraht (quantum wire)
aQWR	zusätzlicher Quantendraht (additional quantum wire)
uQWR	unverspannter Quantendraht (unstrained quantum wire)

Abbildungsverzeichnis

1	Kristallstruktur von GaAs	4
2	Bandstruktur von GaAs	5
3	Quantenfilm mit endlich hohen Barrieren	8
4	Unverspannter T-förmiger Quantendraht	11
5	Aufenthaltswahrscheinlichkeiten an einer unverspannten T-Kreuzung .	14
6	Konturdiagramm der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten	15
7	Reduzierte Zustandsdichten in niedrigdimensionalen Systemen	16
8	Historische Entwicklung der Einschlussenergien	18
9	Verschiebung und Aufspaltung des Leitungsbands durch Verspannungen	28
10	Schema des Simulationsgebiets	35
11	Bandlücken in Abhängigkeit von der Gitterkonstante	40
12	Verspannungsinduzierter Quantendraht	41
13	Elemente des Verzerrungstensors im Simulationssystem	43
14	Verlauf der xx -Komponente des Verzerrungstensors in y -Richtung . . .	44
15	Hydrostatische Verzerrung	46
16	Komponenten des Auslenkungsvektors	47
17	Elemente des Verzerrungstensors im Kristallsystem	48
18	Bandkanten unter dem Einfluss von Verspannungen	50
19	Aufenthaltswahrscheinlichkeiten an einer verspannten Kreuzung	51
20	Konturdiagramm der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten	51
21	Einfluss der Verzerrungen auf die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten . . .	53
22	Abhängigkeit der Einschlussenergie vom Indium-Gehalt des (011)-Films	55
23	Abhängigkeit der Einschlussenergie vom Indium-Gehalt des (100)-Films	56
24	Abhängigkeit der Einschlussenergie von der Dicke des (011)-Films . . .	57
25	Abhängigkeit der Einschlussenergie von der Dicke des (100)-Films . . .	58
26	Überwachsen von Spaltflächen	61
27	Spezieller Probenhalter zum <i>In-situ</i> -Spalten von Proben	62
28	Einbau von überwachsenen Proben in den Kryostaten	63
29	Grundlegende Schritte des Photolumineszenz-Prozesses	65
30	Abhängigkeit der Exziton-Lokalisierung von Grenzflächenrauigkeiten . .	68
31	Emission und Absorption in niedrigdimensionalen Systemen	69
32	Prinzipieller Versuchsaufbau	72
33	Räumliche Auflösung beim Abrastern einer punktförmigen Quelle . . .	75
34	Prinzip des Rasterns über eine Kante	76
35	Räumliche Auflösung beim Rastern über eine Kante	77
36	Bestimmung der spektralen Auflösung	78

37	Benutzeroberfläche der Auswertesoftware	80
38	Schematische Darstellung der unverspannten Quantendrahtstruktur . . .	82
39	Probenparameter des untersuchten unverspannten Quantendrahts . . .	83
40	Schema des abgerasterten Bereichs und des Anregungs-/Detektionsfokus	84
41	Flächenrasterung und Spektrum von QW1, QW2 und uQWR	85
42	Zusammenfassung der Spektren	87
43	Polarisationsabhängige Spektren des QW1	88
44	Polarisationsabhängige Spektren des QW2	89
45	Polarisationsabhängige Spektren des uQWR	90
46	Temperaturabhängige Spektren des QW1	91
47	Temperaturabhängige Spektren des uQWR	92
48	Normiertes PL-Signal des QW1 für verschiedene Anregungsleistungen .	94
49	Normiertes PL-Signal des uQWR für verschiedene Anregungsleistungen	94
50	Abhängigkeit der Einschlussenergie von der Anregungsleistung	95
51	Skizze der Struktur mit verspannten T-förmigen Kreuzungen	97
52	Winkeldefinitionen für Röntgenbeugung in GID-Geometrie	99
53	Drauf- und Seitenansicht wichtiger Winkel und Vektoren	101
54	Experimentelle Anordnung für die Röntgenmessungen	103
55	Konventionelle Röntgenbeugung am (022)- und (200)-Reflex	105
56	GID-Spektrum am (022)- und (200)-Reflex	106
57	Tiefenaufgelöstes GID-Signal am (200)-Reflex	108
58	Verbesserte Anordnung für Röntgenmessungen am (200)-Reflex	109
59	Konventionelle Röntgenbeugung und GID-Spektrum am (200)-Reflex .	110
60	Flächenrasterung und Spektrum am Ort der verspannten Kreuzungen .	112
61	Flächenrasterung und Spektrum der Übergitter-Quantenfilme	114
62	Spektren der Übergitter-Quantenfilme entlang der [100]-Richtung . . .	115
63	Polarisationsabhängige Spektren am Ort der verspannten Kreuzungen .	116
64	Polarisationsabhängige Spektren der Übergitter-Quantenfilme	117
65	Temperaturabhängige Spektren am Ort der verspannten Kreuzungen .	118
66	Schema der Strukturen mit verspannten Einfach-Quantendrähten . . .	121
67	AFM-Aufnahmen der Probe A	123
68	AFM-Aufnahmen der Probe B	124
69	Flächenrasterung und Spektrum aller Quantenfilme (Proben A und B)	126
70	Flächenrasterung und Spektrum aller Quantendrähte (Probe A)	128
71	Flächenrasterung und Spektrum aller Quantendrähte (Probe B)	130
72	Flächenrasterung und Spektrum von aQWR1 und aQWR2 (Probe B) .	131
73	Zusammenfassung der Spektren	133
74	Kombination räumlicher und spektraler Information (Probe A)	134

75	Experimentelle und berechnete Einschlussenergien	135
76	Polarisationsabhängige Spektren der Quantenfilme	136
77	Polarisationsabhängige Spektren der Quantendrähte	137
78	Temperaturabhängige Spektren der Quantenfilme	139
79	Temperaturabhängige Spektren der Quantendrähte	140
80	Spektren der Quantenfilme bei verschiedenen Anregungsleistungen . . .	142
81	Intensität der Quantenfilme bei verschiedenen Anregungsleistungen . .	143
82	Spektren der Quantendrähte bei verschiedenen Anregungsleistungen . .	144
83	Abhängigkeit der Einschlussenergie von der Anregungsleistung	146
84	Makro-Photolumineszenz-Spektren von [100]- und [011]-Strukturen . .	151
85	Skizze der mit dem Nachheizverfahren gewachsenen Probe	152
86	AFM-Vergleich von Proben mit und ohne Oberflächenglättung	155
87	AFM-Bilder von typischen Strukturen auf geglätteten (0 $\bar{1}1$)-Flächen . .	157
88	Lage der Gallium-Arsen-Bindungsketten	159
89	Verspannungsinduzierter Quantenpunkt	161
90	Modifizierter verspannungsinduzierter Quantendraht	162
91	Aufenthaltswahrscheinlichkeiten an einer verspannten T-Kreuzung . . .	163
92	Konturdiagramm der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten	164

Tabellenverzeichnis

1	Zahlenwerte der verwendeten Simulationsparameter	38
2	Zahlenwerte der nichtverschwindenden Krümmungsparameter	39

Literatur

- [Ada94] S. Adachi, *GaAs and related materials*, World Scientific, Singapore (1994).
- [Aki96a] H. Akiyama, T. Someya und H. Sakaki, Phys. Rev. B **53**, R16160 (1996).
- [Aki96b] H. Akiyama, T. Someya und H. Sakaki, Phys. Rev. B **53**, R4229 (1996).
- [Aki98] H. Akiyama, T. Someya, M. Yoshita, T. Sasaki und H. Sakaki, Phys. Rev. B **57**, 3765 (1998).
- [Aki02] H. Akiyama, L. Pfeiffer, A. Pinczuk, K. West und M. Yoshita, Solid State Commun. **122**, 169 (2002).
- [Ara82] Y. Arakawa und H. Sakaki, Appl. Phys. Lett. **40**, 939 (1982).
- [Ara86] Y. Arakawa und A. Yariv, IEEE J. Quantum Electron. **22**, 1887 (1986).
- [Bal73] A. Baldereschi und N. Lipari, Phys. Rev. B **8**, 2697 (1973).
- [Bas96] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Les Éditions de Physique, Les Ulis Cedex (1996).
- [Bha93] P. Bhattacharya, *Properties of lattice matched and strained indium gallium arsenide*, INSPEC, Stevenage (1993).
- [Bin86] G. Binnig, C. Quate und C. Gerber, Phys. Rev. Lett. **56**, 930 (1986).
- [Bir74] G. Bir und G. Pikus, *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*, Wiley, New York (1974).
- [Boc94] U. Bockelmann, Semicond. Sci. Technology **9**, 865 (1994).
- [Bru94] K. Brunner, G. Abstreiter, G. Böhm, G. Tränkle und G. Weimann, Appl. Phys. Lett. **64**, 3320 (1994).
- [Cha85] Y. Chang, L. Chang und L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **47**, 1324 (1985).
- [Cin91] R. Cingolani, H. Lage, L. Tapfer, H. Kalt, D. Heitmann und K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **67**, 891 (1991).
- [Cor96] T. Corle und G. Kino, *Confocal scanning optical microscopy and related imaging systems*, Academic Press, San Diego (1996).

- [Dav98] J. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors*, Cambridge University Press, Cambridge (1998).
- [Esa69] L. Esaki und R. Tsu, IBM Research Note RC-2418 (1969).
- [Fen04] M. Feng, N. Holonyak jr. und W. Hafez, Appl. Phys. Lett. **84**, 151 (2004).
- [Gam96] D. Gammon, E. Snow, B. Shanabrook, D. Katzer und D. Park, Science **273**, 87 (1996).
- [Ger90] D. Gershoni, J. Weiner, S. Chu, G. Baraff, J. Vandenberg, L. Pfeiffer, K. West, R. Logan und T. Tanbun-Ek, Phys. Rev. Lett. **65**, 1631 (1990).
- [Gis96] H. Gislason, W. Langbein und J. Hvam, Appl. Phys. Lett. **69**, 3248 (1996).
- [Glu97] S. Glutsch, F. Bechstedt, W. Wegscheider und G. Schedelbeck, Phys. Rev. B **56**, 4108 (1997).
- [Gme02] N. Gmeinwieser, *Aufbau eines konfokalen Meßplatzes zur Photolumineszenz- und Raman-Spektroskopie an Gruppe III-Nitriden*, Diplomarbeit, Universität Regensburg (2002).
- [Gon92] A. Goñi, L. Pfeiffer, K. West, A. Pinczuk, H. Baranger und H. Stormer, Appl. Phys. Lett. **61**, 1956 (1992).
- [Gro94] R. Grober, T. Harris, J. Trautman, E. Betzig, W. Wegscheider, L. Pfeiffer und K. West, Appl. Phys. Lett. **64**, 1421 (1994).
- [Gru98] M. Grundmann, O. Stier und D. Bimberg, Phys. Rev. B **58**, 10557 (1998).
- [Gru00] M. Grundmann, O. Stier, A. Schliwa und D. Bimberg, Phys. Rev. B **61**, 1744 (2000).
- [Hac02] S. Hackenbuchner, *Elektronische Struktur von Halbleiter-Nanobauelementen im thermodynamischen Nichtgleichgewicht*, Dissertation, Technische Universität München (2002).
- [Haj03] H. Hajak, *Photolumineszenz- und Photolumineszenzanregungsspektroskopie der niedrigdimensionalen GaAs-basierenden Halbleiterstrukturen*, Diplomarbeit, Universität Regensburg (2003).
- [Has97] J. Hasen, L. Pfeiffer, A. Pinczuk, S. He, K. West und B. Dennis, Nature **390**, 54 (1997).

- [Hay02] Y. Hayamizu, M. Yoshita, S. Watanabe, H. Akiyama, L. Pfeiffer und K. West, Appl. Phys. Lett. **81**, 4937 (2002).
- [Hel98] W. Heller, U. Bockelmann und G. Abstreiter, Phys. Rev. B **57**, 6270 (1998).
- [Hen74] J. Hensel und K. Suzuki, Phys. Rev. B **9**, 4219 (1974).
- [Hes94] H. Hess, E. Betzig, T. Harris, L. Pfeiffer und K. West, Science **264**, 1740 (1994).
- [Hex91] X. He, Phys. Rev. B **43**, 2063 (1991).
- [Hol98] D. Holmes, E. Tok, J. Sudijono, T. Jones und B. Joyce, J. Cryst. Growth **192**, 33 (1998).
- [Hol99] V. Holý, U. Pietsch und T. Baumbach, *High-resolution x-ray scattering from thin films and multilayers*, Springer, Berlin (1999).
- [Jen01] J. Jensen, J. Hvam und W. Langbein, J. Cryst. Growth **227-228**, 966 (2001).
- [Kan69] E. Kane, Phys. Rev. **178**, 1368 (1969).
- [Kap97] E. Kapon, Seite 99 in G. Abstreiter (Hrsg.), *Optical spectroscopy of low dimensional semiconductors*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1997).
- [Kas91] K. Kash, D. Mahoney und H. Cox, Phys. Rev. Lett. **66**, 1374 (1991).
- [Kel95] M. Kelly, *Low-dimensional semiconductors*, Clarendon Press, Oxford (1995).
- [Kli97] C. Klingshirn, *Semiconductor optics*, Springer, Berlin (1997).
- [Lan70] L. Landau und E. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik VII - Elastizitätstheorie*, Akademie-Verlag, Berlin (1970).
- [Lan96] W. Langbein, H. Gislason und J. Hvam, Phys. Rev. B **54**, 14595 (1996).
- [Lim94] M. Li, *Modern semiconductor quantum physics*, World Scientific, Singapore (1994).
- [Los98] D. Loss und D. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [Lut56] J. Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
- [Mat70] J. Matthews, S. Mader und T. Light, J. Appl. Phys. **41**, 3800 (1970).
- [Mat92] H. Mathieu, P. Lefebvre und P. Christol, Phys. Rev. B **46**, 4092 (1992).

- [Mat03] K. Matsuda, T. Saiki, S. Nomura, M. Mihara, Y. Aoyagi, S. Nair und T. Takagahara, Phys. Rev. Lett. **91**, 177401 (2003).
- [Mee96] T. Meeker, IEEE Trans. Ultrason. Ferr. Freq. Contr. **43**, 717 (1996).
- [Mer63a] J. van der Merwe, J. Appl. Phys. **34**, 117 (1963).
- [Mer63b] J. van der Merwe, J. Appl. Phys. **34**, 123 (1963).
- [Nex04] www.wsi.tum.de/nextnano3 und www.nextnano.de (2004).
- [Oga95] T. Ogawa und Y. Kanemitsu, *Optical properties of low-dimensional materials 1*, World Scientific, Singapore (1995).
- [Oga98] M. Ogasawara, H. Sugiura, M. Mitsuhashi, M. Yamamoto und M. Nakao, J. Appl. Phys. **84**, 4775 (1998).
- [Ohj03] J. Oh, M. Yoshita, H. Akiyama, L. Pfeiffer und K. West, Appl. Phys. Lett. **82**, 1709 (2003).
- [Osh85] D. O'Shea, *Elements of modern optical design*, Wiley, New York (1985).
- [Pfe90] L. Pfeiffer, K. West, H. Stormer, J. Eisenstein, K. Baldwin, D. Gershoni und J. Spector, Appl. Phys. Lett. **56**, 1697 (1990).
- [Reg99] D. Regelman und D. Gershoni, Seite 1111 in D. Gershoni (Hrsg.), *Proceedings of the 24th International Conference on the Physics of Semiconductors*, World Scientific, Singapore (1999).
- [Rei04] E. Reinwald, *persönliche Mitteilung* (2004).
- [Sch87] S. Schmitt-Rink, D. Miller und D. Chemla, Phys. Rev. B **35**, 8113 (1987).
- [Sch97] G. Schedelbeck, W. Wegscheider, M. Bichler und G. Abstreiter, Science **278**, 1792 (1997).
- [Sch98] G. Schedelbeck, *Optische Eigenschaften von Halbleiternanostrukturen hergestellt durch Überwachsen von Spaltflächen*, Dissertation, Technische Universität München (1998).
- [Sch04a] R. Schuster, H. Hajak, M. Reinwald, W. Wegscheider, D. Schuh, M. Bichler, S. Birner, P. Vogl und G. Abstreiter, in *Proceedings of the 27th International Conference on the Physics of Semiconductors*, Flagstaff (2004) im Druck.

- [Sch04b] R. Schuster, H. Hajak, M. Reinwald, W. Wegscheider, G. Schedelbeck, S. Sedlmaier, M. Stopa, S. Birner, P. Vogl, J. Bauer, D. Schuh, M. Bichler und G. Abstreiter, *Phys. Status Solidi C* **1**, 2028 (2004).
- [Sch04c] R. Schuster, H. Hajak, M. Reinwald, W. Wegscheider, D. Schuh, M. Bichler und G. Abstreiter, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 3672 (2004).
- [Sch04d] R. Schuster, H. Hajak, M. Reinwald, W. Wegscheider, D. Schuh, M. Bichler und G. Abstreiter, *Physica E* **21**, 236 (2004).
- [Som95a] T. Someya, H. Akiyama und H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **66**, 3672 (1995).
- [Som95b] T. Someya, H. Akiyama und H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3664 (1995).
- [Som96] T. Someya, H. Akiyama und H. Sakaki, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2965 (1996).
- [Sri92] V. Srinivas, J. Hryniewicz, Y. Chen und C. Wood, *Phys. Rev. B* **46**, 10193 (1992).
- [Szt03] M. Sztucki, T. Schüllli, T. Metzger, V. Chamard, R. Schuster und D. Schuh, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 872 (2003).
- [Szt04] M. Sztucki, *The Use of Synchrotron Radiation to study Overgrowth Phenomena in InAs/GaAs Nanostructures*, Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München (2004).
- [Uly99] A. Ulyanenko, N. Darowski, J. Grenzer, U. Pietsch, K. Wang und A. Forchel, *Phys. Rev. B* **60**, 16701 (1999).
- [Var67] Y. Varshni, *Physica* **34**, 149 (1967).
- [Vur01] I. Vurgaftman, J. Meyer und L. Ram-Mohan, *J. Appl. Phys.* **89**, 5815 (2001).
- [Wag01] H. Wagner, H. Tranitz, R. Schuster, R. Engelhardt, U. Pohl und D. Bimberg, *Phys. Status Solidi B* **224**, 195 (2001).
- [Wal87] C. van de Walle und R. Martin, *Phys. Rev. B* **35**, 8154 (1987).
- [Wal89] C. van de Walle, *Phys. Rev. B* **39**, 1871 (1989).
- [Wal97] S. Walck, T. Reinecke und P. Knipp, *Phys. Rev. B* **56**, 9235 (1997).
- [War69] B. Warren, *X-ray diffraction*, Addison-Wesley, Reading (1969).
- [War90] C. Warwick, W. Jan, A. Ourmazd und T. Harris, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 2666 (1990).

- [Weg93] W. Wegscheider, L. Pfeiffer, M. Dignam, A. Pinczuk, K. West, S. McCall und R. Hull, Phys. Rev. Lett. **71**, 4071 (1993).
- [Weg94] W. Wegscheider, L. Pfeiffer, K. West und R. Leibenguth, Appl. Phys. Lett. **65**, 2510 (1994).
- [Weg97a] W. Wegscheider, L. Pfeiffer, K. West, A. Kiselev, M. Hagn und R. Leibenguth, Seite 127 in G. Abstreiter (Hrsg.), *Optical spectroscopy of low dimensional semiconductors*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1997).
- [Weg97b] W. Wegscheider, G. Schedelbeck, G. Abstreiter, M. Rother und M. Bichler, Phys. Rev. Lett. **79**, 1917 (1997).
- [Weg98] W. Wegscheider, G. Schedelbeck, M. Bichler und G. Abstreiter, Physica E **3**, 103 (1998).
- [Wei81] C. Weisbuch, R. Dingle, A. Gossard und W. Wiegmann, Solid State Commun. **38**, 709 (1981).
- [Wei91] C. Weisbuch und B. Vinter, *Quantum semiconductor structures*, Academic Press, Boston (1991).
- [Wuq99] Q. Wu, R. Grober, D. Gammon und D. Katzer, Phys. Rev. Lett. **83**, 2652 (1999).
- [Yan93] F. Yang, M. Wilkinson, E. Austin und K. O'Donnell, Phys. Rev. Lett. **70**, 323 (1993).
- [Yos98] M. Yoshita, H. Akiyama, T. Someya und H. Sakaki, J. Appl. Phys. **83**, 3777 (1998).
- [Yos01a] M. Yoshita, H. Akiyama, L. Pfeiffer und K. West, Jpn. J. Appl. Phys. **40**, L252 (2001).
- [Yos01b] M. Yoshita, N. Kondo, H. Sakaki, M. Baba und H. Akiyama, Phys. Rev. B **63**, 075305 (2001).
- [Yos02] M. Yoshita, H. Akiyama, L. Pfeiffer und K. West, Appl. Phys. Lett. **81**, 49 (2002).
- [Yup96] P. Yu und M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors*, Springer, Berlin (1996).
- [Zre94] A. Zrenner, L. Butov, M. Hagn, G. Abstreiter, G. Böhm und G. Weimann, Phys. Rev. Lett. **72**, 3382 (1994).

Dank

Zunächst möchte ich mich bei *Prof. Dr. Werner Wegscheider* für das interessante und vielseitige Thema bedanken. Seine fortwährende Unterstützung in jeglicher Hinsicht hat entscheidend zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Wichtige Resultate ergaben sich aus lohnenden Kooperationen innerhalb des Sonderforschungsbereichs 348. Hier geht mein Dank an *Stefan Birner*, *Dr. Michael Sztucki* und *Dr. Till Hartmut Metzger*.

Ich danke *Christian Truppel* und vor allem *Harald Hajak*, die mit ihren Diplomarbeiten wertvolle Aufbauarbeit leisteten und viele zeitintensive Messreihen durchführten.

Mein Dank gilt *Elisabeth Reinwald*, auf deren Fertigkeiten die aussagekräftigen Rasterkraftmikroskop-Aufnahmen beruhen, *Thomas Herrle* für seine Kompetenz bei den aufwändigen Röntgenuntersuchungen sowie *Nikolaus Gmeinwieser*, dessen Programme die mitgelieferte Gerätesoftware überflüssig machten und viele Messreihen erst ermöglichten.

Die hervorragende Probenqualität erleichterte alle Messungen erheblich. Dafür spreche ich *Prof. Dr. Werner Wegscheider*, *Dr. Peter Tranitz*, *Dr. Dieter Schuh*, *Matthias Reinwald* und *Max Bichler* meinen Dank aus.

Für kompetente Unterstützung in technischen Fragen sei *Christof Ermer*, *Peter Müller*, *Siegfried Heider*, *Ulrich Zacharias* und allen *Mitarbeitern der Mechanischen Werkstatt der Fakultät Physik* gedankt.

Dank gebührt *Annemarie Dinkel* und *Renate Creuzburg*, bei denen alle Verwaltungs- und Organisationsaufgaben in zuverlässigen Händen waren.

Ich möchte dankend die gute Atmosphäre unter den *Mitarbeitern des Lehrstuhls* erwähnen, die ein angenehmes und konstruktives Arbeiten ermöglichte.

Großen Dank schulde ich meinen akkuraten Korrekturlesern. Neben bereits genannten Personen investierten *Harald Broll*, *Christina Gentzik*, *Matthias Habl*, *Tanja Hajak*, *Klaus Wagenhuber* und *Dr. Andreas Wensauer* ihre kostbare Zeit in diese mühevollen Angelegenheit.

Dank verdienen *meine Eltern* für ihre andauernde Unterstützung. Herzlich danke schön sagen möchte ich meiner Verlobten *Tanja Müller*, die mir mit ihrer liebevollen Art stets zur Seite stand und dabei immer eine große Hilfe war.